



Filipa Isabel dos Santos Flora Alves Bona

Licenciada em Ciências da Engenharia Química e Bioquímica

Simulação processual da unidade *Hydrocracker* e *Fluid Catalytic Cracker* com resultados em Ambiente de Business Intelligence

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Química e Bioquímica

Orientador: Doutor Nuno Garrido, Galp Energia

Co-orientador: Professor Doutor Mário Eusébio, FCT/UNL

Júri:

Presidente: Professor Doutor Pedro Miguel Calado Simões.

Arguente: Professor Doutor José Paulo Barbosa Mota.

Vogal: Doutor Nuno Miguel Ferreira Garrido.

Setembro 2019



FACULDADE DE
CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Filipa Isabel dos Santos Flora Alves Bona

Licenciada em Ciências da Engenharia Química e Bioquímica

**Simulação processual da unidade *Hydrocracker*
e *Fluid Catalytic Cracker* com resultados em
Ambiente de Business Intelligence**

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Química e Bioquímica

Orientador: Doutor Nuno Garrido, Galp Energia

Co-orientador: Professor Doutor Mário Eusébio, FCT/UNL

[Simulação processual da unidade *Hydrocracker* e *Fluid Catalytic Cracker* com Resultados em Ambiente de *Business Intelligence*]

Copyright © Filipa Isabel dos Santos Flora Alves Bona, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa.

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade Nova de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor

Agradecimentos

O estágio curricular realizado no âmbito da presente dissertação de mestrado apenas foi possível devido a várias entidades às quais faço questão de expressar o meu agradecimento.

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer à Galp Energia, por me ter dado a oportunidade de realizar a minha dissertação na Refinaria de Sines. Este estágio foi sem dúvida alguma uma experiência bastante enriquecedora que contribuiu para o meu crescimento profissional.

Ao meu orientador, Engenheiro Nuno Garrido, pela transmissão de conhecimentos que foram muito importantes no desenvolvimento do trabalho. Gostaria de agradecer também pela forma como me recebeu na sua equipa assim como a disponibilidade e ajuda ao longo do estágio.

Ao co-orientador da presente dissertação, Professor Mário Eusébio, gostaria de agradecer o tempo que disponibilizou para me orientar, e as suas sugestões e sentido crítico que me ajudaram a desenvolver um melhor trabalho.

Ao Engenheiro Luís Rodrigues, queria expressar o meu agradecimento por todo o tempo que disponibilizou durante estes 6 meses ajudando ao desenvolvimento do meu trabalho. Pelos diversos conhecimentos transmitidos esclarecendo todas as minhas dúvidas e curiosidade acerca de refinação.

Queria também agradecer à Engenheira Juliana Almeida pela preciosa ajuda na iniciação à programação e pelo apoio e companheirismo durante o meu estágio em Sines.

Uma especial atenção à equipa de Análise de Performance e Processamento de Dados: à Mónica Carvalho, Vanda Paleta, Isabel Flores, Thiago Aguiar, Pedro Antunes, Pedro Pinela, António Pinto e Liliana Faria pela simpatia constante e acolhimento na equipa.

Aos meus colegas de faculdade e amigos que facilitaram esta caminhada com momentos de boa disposição.

Ao meu namorado pela amizade e apoio que sempre me deu ao longo da minha temporada em Sines.

Por último quero agradecer à minha família, pais e irmão, por todo o apoio e motivação que sempre me deram ao longo da minha vida académica.

O meu sincero obrigado a todos!

Resumo

Com o crescente aparecimento dos desafios transformacionais da indústria petroquímica a nível tecnológico, a necessidade de soluções digitais com vista a promover a excelência operacional tornou-se essencial.

Este trabalho visa precisamente calibrar e validar duas unidades distintas da Refinaria de Sines, o *Hydrocracker* e o *Fluid Catalytic Cracking*, utilizando o software de simulação Petro-SIM™. O modelo do FCC foi atualizado de acordo com o *revamping* feito recentemente à unidade.

Estes modelos foram validados e calibrados recorrendo a casos de estudo baseados em dados históricos da refinaria, de modo a minimizar os desvios entre os valores reais e os valores simulados.

Estes modelos foram parametrizados e desenvolvidos de modo a serem utilizados para prever o comportamento do processo numa *digital twin*, transmitindo os referidos valores para uma *dashboard* em ambiente de *Business Intelligence*. A *dashboard* construída contém dois ficheiros diferentes: um para a criação de análise de sensibilidade e outro para comparar dois cenários.

Os modelos permitem desta forma efetuar simulações consoante os inputs colocados na *dashboard*, retornando em resultados que constituem assim ferramentas de modelação com capacidade preditiva e adaptabilidade nas áreas de eficiência energética e otimização de processos.

Palavras-chave: gasóleo de vácuo, craqueamento, Petro-SIM™.

Abstract

With the growing technological challenges of the petrochemical industry, the need for digital solutions to promote operational excellence has become essential.

The work done in this dissertation aims precisely to calibrate and validate two distinct units of Sines Refinery, the *Hydrocracker* and the *Fluid catalytic cracking*, using the simulation software Petro-SIM™.

These two conversion units of the Refinery process vacuum gas oil and produce high value-added products such as gasoline in FCC and diesel in HC. The FCC model has been updated with the unit's recent revamping.

These models were validated and calibrated using case studies based on historical refinery data to minimize deviations between actual and simulated values.

These models were parameterized and developed to be used to predict the process behavior in a twin digital, transmitting these values to a dashboard in a *Business Intelligence* environment. The built dashboards contain two different files: one for sensitivity analysis and another for comparing two scenarios.

The models allow simulations according to the inputs placed on dashboard, returning results that constitute modelling tools with predictive capacity and adaptability in the areas of energy efficiency and process optimization.

Keywords: vacuum gasoil, cracking, Petro-SIM™.

Índice

1.Introdução.....	1
1.2 Enquadramento e Motivação	1
1.3 Refinaria de Sines	2
1.4 Objetivos.....	3
2 Estado de Arte	4
2.1 Indústria 4.0.....	4
2.1.1 Digitalização no Mundo	6
2.1.2 Tecnologias da Indústria 4.0	7
2.1.3 Business Intelligence.....	7
2.1.4 Dashboards	11
2.2 Modelos Simulação Processual	13
2.2.1 Integração com Microsoft Excel	13
2.2.2 Modelos Termodinâmicos-Pacotes de propriedades do Petro-SIM™	14
2.2.3 Introdução às Estratégias.....	16
2.2.4 Estratégia de Validação.....	16
2.2.5 Estratégia de Calibração	17
2.3 Data Science-Breve introdução à Programação em R	19
2.4 Splitter de Propileno	21
2.4.1 High Pressure System.....	21
2.4.2 Heat Pumped System.....	21
2.5 Hydrocracker	23
2.6 Fluid Catalytic Cracking.....	27
3 Estratégias e Metodologias	34
3.1 Validação e Calibração do Modelo de HC	34
3.1.1 Validação do HC.....	36
3.1.2 Aproximação à realidade.....	37
3.1.3 Dashboard	41
3.2 Validação e Calibração do Modelo de FCC (Fluid Catalytic Cracking).....	42
3.2.1 Validação do FCC	42
3.2.2 Sigma Fine	43
3.2.3 Calibração do FCC	43
3.2.4 Catalyst Cooler	45
3.3 Programação em R	47
3.3.1 Unidade de Hydrocracker.....	47
3.4 Splitter de propileno	49
3.4.1 Técnicas de Destilação	49
3.4.2 Caso de estudo: High Pressure System	49
3.4.3 Caso de estudo: Heat Pumped System	52

3.4.4	Caso de Estudo: <i>C3 Splitter</i>	53
3.4.5	<i>C3 Splitter</i> aplicado à respetiva corrente de propileno do FCC	53
3.4.6	Heat Pumped System + <i>C3 Splitter</i>	54
4	Apresentação e Discussão de Resultados Obtidos	58
4.1	Validação e Calibração do Modelo de HC	58
4.1.1	Análise às curvas de destilação	58
4.1.2	Análise aos rendimentos com o Balanço Diário	69
4.1.3	Análise aos rendimentos com as medições dos caudalímetros	73
4.1.4	Inclusão de novos dados	77
4.1.5	Dashboards	79
4.2	Validação e Calibração do Modelo de FCC (Fluid Catalytic Cracker)	82
4.2.1	Calibração do FCC	82
4.2.2	Catalyst Cooler	84
4.3	Programação em R – Previsão de Cargas	86
4.3.1	Cargas de Hydrocracker -Possíveis Correlações entre as variáveis do <i>Test-Run</i>	86
4.3.2	Cargas de Hydrocracker -Possíveis Correlações entre os componentes da mesma 89	
4.3.3	Análise às cargas do Hydrocracker com restantes unidades	91
4.4	Splitter de Propileno	92
4.4.1	Caso de estudo: <i>High Pressure System</i>	92
4.4.2	Caso de estudo: <i>Heat Pumped System</i>	93
4.4.3	Caso de estudo: <i>C3 Splitter</i>	94
4.4.4	<i>C3 Splitter</i> aplicado à respetiva corrente de propileno do FCC	95
4.4.5	Heat Pumped System + <i>C3 Splitter</i>	101
5	Conclusão	110
5.1	Validação e Calibração do Hydrocracker	110
5.2	Validação e Calibração do FCC	110
5.3	Programação em R	110
5.4	Splitter de Propileno	110
	Referências Bibliográficas	112
	Anexos	117
	Anexo I	117

Índice de Figuras

Figura 1.1 - Conceito de digitalização.....	1
Figura 1.2 - Esquema representativo do objetivo da tese.....	2
Figura 1.3 - Esquema Geral.....	3
Figura 2.1 - Evolução das Revoluções Industriais adaptado de [70].....	4
Figura 2.2 - Níveis de Maturação da Indústria 4.0.[71].....	5
Figura 2.3 - Tecnologias da Indústria 4.0 [10].....	7
Figura 2.4 - Esquema simplificado do Conceito de Business Intelligence [24]	8
Figura 2.5 - Esquema adaptado do sistema de Business Intelligence [23].	8
Figura 2.6 - Arquitetura BI [25].	9
Figura 2.7 - Aplicação de Business Intelligence [24].	10
Figura 2.8 - Esquema adaptado dos diferentes passos na construção de uma dashboard [64].	11
Figura 2.9 - Aumento da qualidade de validação.....	17
Figura 2.10 - Esquema das 3 etapas da calibração adaptado de [42].	18
Figura 2.11 - Crescimento Global de Dados [45].....	19
Figura 2.12 - Esquema da programação em R.....	19
Figura 2.13 - High Pressure System [72].	21
Figura 2.14 - Heat Pumped System.[72].....	22
Figura 2.15 - Catalisador do tipo Zeólito Y.....	24
Figura 2.16 - Representação esquemática da unidade do HC [50].	25
Figura 2.17 - Reações que ocorrem inicialmente [51].	26
Figura 2.18 - Hydrocracking de um aromatico polinuclear [73].	27
Figura 2.19 - Flowsheet do FCC.[50]	28
Figura 2.20 - Duas diferentes configurações do FCC [50].	28
Figura 2.21 - Esquema geral duma típica unidade de FCC [57].	29
Figura 2.22 - Esquema do FCC proposto pela UOP.....	31
Figura 2.23 - Complexo de FCC da UOP[50]	31
Figura 2.24 - Reações que ocorrem durante o processo adaptado de [16].	31
Figura 2.25 - Representação Esquemática do cacking selectivo efectuado pelo zéolito[50].	32
Figura 3.1 - Esquema do Hydrocracker	34
Figura 3.2 - Esquema dos passos onde se retira o Excel	35
Figura 3.3 - Ambiente do Excel criado pelo Petro-SIM™.....	35
Figura 3.4 - Metodologia: Etapa Validação	36
Figura 3.5 - Excel já preenchido para a 1ª simulação.....	37
Figura 3.6 - Ambiente do reator	38
Figura 3.7 - Convergence Target, Operating Data -Hydrocracker.....	38
Figura 3.8 - Recycle Gas Target, Operating Data Hydrocracker	39
Figura 3.9 - Reactor Data, Operating Data Hydrocracker.....	39
Figura 3.10 - Reactor Bed Data, Operating Data Hydrocracker	40
Figura 3.11 - HPS,Operating Data Hydrocracker.....	40
Figura 3.12 - Recycle Data,Operating Data Hydrocracker	41
Figura 3.13 - Modelo FCC do Petro-SIM™	42
Figura 3.14 - Meter da carga ao FCC	44
Figura 3.15 - Etapas do Calibrate do Petro-SIM™.....	44
Figura 3.16 - Modelo Anterior do FCC	45
Figura 3.17 - Nova configuração do Modelo do FCC.....	45
Figura 3.18 - Target dos valores de vapor	46
Figura 3.19 - Esquema representativo da recolha de amostras	47
Figura 3.20 - Esquema representativo das tarefas	48
Figura 3.21 - Coluna já definida com os respetivos inputs.	50
Figura 3.22 - Esquemática do processo	50
Figura 3.23 - Características e inputs da corrente de propileno.....	52
Figura 3.24 - Esquema do novo processo com o compressor	52
Figura 3.25 - Casos do Petro-SIM™ em específico C3 Splitter.....	53
Figura 3.26 - Coluna C3 Splitter pormenorizada.....	54
Figura 3.27 - Esquema das análises de sensibilidade realizadas	54
Figura 3.28 - Heat Pumped System	55
Figura 3.29 - Esquema do Heat Pumped System sem a coluna principal	55

Figura 3.30 - Esquema das análises de sensibilidade realizadas.	56
Figura 4.1 - Nafta Ligeira Real VS Simulação 25/09/2018	58
Figura 4.2 - Nafta Ligeira Real VS Simulação 02/10/2018	59
Figura 4.3 - Nafta Ligeira Real VS Simulação 09/10/2018	59
Figura 4.4 - Nafta Ligeira Real VS Simulação 16/10/2018	60
Figura 4.5 - Nafta Pesada Real VS Simulação-25/09/2018.....	60
Figura 4.6 - Nafta Pesada Real VS Simulação-02/10/2018.....	61
Figura 4.7 - Nafta Pesada Real VS Simulação-09/10/2018.....	61
Figura 4.8 - Nafta Pesada Real VS Simulação-16/10/2018.....	61
Figura 4.9 - Queroseno Real VS Simulação 25/09/2018.....	62
Figura 4.10 - Queroseno Real VS Simulação 02/10/2018.....	62
Figura 4.11 - Queroseno Real VS Simulação 09/10/2018.....	63
Figura 4.12 - Queroseno Real VS Simulação 16/10/2018.....	63
Figura 4.13 - Gasóleo Real VS Simulação 25/09/2018	64
Figura 4.14 - Gasóleo Real VS Simulação 02/10/2018	64
Figura 4.15 - Gasóleo Real VS Simulação 09/10/2018	65
Figura 4.16 - Gasóleo Real VS Simulação 16/10/2018	65
Figura 4.17 - UCO Real VS Simulação 02/10/2018.....	66
Figura 4.18 - UCO Real VS Simulação 09/10/2018.....	66
Figura 4.19 - Hidrogénio Real VS Simulação 25/09/2018	67
Figura 4.20 - Hidrogénio Real VS Simulação 02/10/2018	67
Figura 4.21 - Hidrogénio Real VS Simulação 09/10/2018	68
Figura 4.22 - Hidrogénio Real VS Simulação 16/10/2018	68
Figura 4.23 - Rendimentos do Hidrogénio Real VS Simulação (BD).....	69
Figura 4.24 - Rendimentos do H ₂ S Real VS Simulação (BD)	70
Figura 4.25 - Rendimentos do Fuel Gás Real VS Simulação (BD)	70
Figura 4.26 - Rendimentos do Propano Real VS Simulação (BD).	71
Figura 4.27 - Rendimentos do Butano Real VS Simulação (BD).....	71
Figura 4.28 - Rendimentos da Nafta Ligeira Real VS Simulação (BD).	71
Figura 4.29 - Rendimentos da Nafta Pesada Real VS Simulação (BD).	72
Figura 4.30 - Rendimentos do Queroseno Real VS Simulação (BD).	72
Figura 4.31 - Rendimentos do Gasóleo Real VS Simulação (BD).....	73
Figura 4.32 - Rendimentos do UCO Real VS Simulação (BD).	73
Figura 4.33 - Rendimentos do Hidrogénio Real VS Simulação (Caudalímetros).	74
Figura 4.34 - Rendimentos do H ₂ S Real VS Simulação (Caudalímetros)	74
Figura 4.35 - Rendimentos do Fuel Gás Real VS Simulação (Caudalímetros).....	75
Figura 4.36 - Soma dos rendimentos do propano e butano VS Simulação (Caudalímetros).....	75
Figura 4.37 - Rendimentos da Nafta Ligeira Real VS Simulação (Caudalímetros).....	76
Figura 4.38 - Rendimentos da Nafta Pesada Real VS Simulação (Caudalímetros).....	76
Figura 4.39 - Rendimentos do Queroseno Real VS Simulação (Caudalímetros).....	76
Figura 4.40 - Rendimentos do Gasóleo Real VS Simulação (Caudalímetros)	77
Figura 4.41 - Rendimentos do UCO Real VS Simulação (Caudalímetros)	77
Figura 4.42 - Dashboard Inicial	79
Figura 4.43 - Dashboard	80
Figura 4.44 - Dashboard Análise de Sensibilidade	81
Figura 4.45 - Dashboard Análise de Cenário	81
Figura 4.46 - Reactor/Calibration do Petro-SIMTM.....	82
Figura 4.48 - Esquema dos processos efetuados.....	82
Figura 4.47 - Seção do Reconcile-Meter Data.....	82
Figura 4.49 - Seção dos dados utilizados no Reconcile	83
Figura 4.50 - Resultados do Reconcile	83
Figura 4.51 - Resultados da Validação	84
Figura 4.52 - Resultados da Calibração.....	84
Figura 4.53 - Valores de Energia:Bed Cooling Water	85
Figura 4.55 - Teste para a comparação de enxofre com a massa volúmica(Random Forest) ..	86
Figura 4.56 - Teste para a comparação de enxofre (teste treino)	86
Figura 4.57 - Matriz Correlação com todas as variáveis.....	87
Figura 4.58 - Matriz Correlação com os respetivos números	87
Figura 4.59 - Características da simulação do hydrocracker.....	88
Figura 4.60 - Gráficos com as relações que tem possibilidade de correlação	89

Figura 4.61 - Silício e Potássio.....	90
Figura 4.62 - Silício e Potássio continuação	90
Figura 4.63 - Cálcio e Vanádio.....	90
Figura 4.64 - Resultado da corrente de topo	92
Figura 4.65 - Resultado da corrente de fundo	92
Figura 4.66 - Características da alimentação.	93
Figura 4.67 - Ambiente da coluna onde aparece o erro	94
Figura 4.68 - Característica da corrente de entrada do C3 Splitter	94
Figura 4.69 - Resultados da corrente de topo	Figura 4.70 - Resultados da
corrente de fundo	95
Figura 4.71 - Ambiente onde se definiu os pratos	96
Figura 4.72 - Gráfico da percentagem mássica em função da utilidade do condensador para diferentes valores de razão de refluxo.	98
Figura 4.73 - Ambiente onde se definiu as diferentes pressões.....	98
Figura 4.74 - Gráfico das pressões em função das utilidades. Ex: o 11 é representativo do 11.29-12.67 bar.	99
Figura 4.75 - Pressão de operação em função dos custos	99
Figura 4.76 - Resultados do C3 Splitter aplicado à corrente de propileno do modelo FCC.	100
Figura 4.77 - Novo modelo sem pratos	100
Figura 4.78 - Variáveis do novo modelo sem pratos.....	101
Figura 4.79 - Energia do revaporizador do C3 Splitter otimizado	101
Figura 4.80 - Novo esquema do Heat Pumped System	102
Figura 4.81 - Pressões em função da energia do compressor do feed.	104
Figura 4.82 - Pressões em função da energia do condensador.	105
Figura 4.83 - Pressões em função da energia do revaporizador.....	105
Figura 4.84 - Pressões em função da energia do compressor.	105
Figura 4.85 - Diagrama do esquema com o permutador no Petro-SIMTM.	106
Figura 4.86 - Variáveis definidas durante o processo.....	107
Figura 4.87 - Resultados do C3 Splitter no sistema de Heat Pumped	108
Figura 7.1 - Economic Data,Operating Data Hydrocracker	117
Figura 7.6 - Reactor Scaling,Operating Data Hydrocracker	119

Índice de Tabelas

Tabela 2.1 - Alimentação de uma unidade de hydrocracking e respetivos produtos.	23
Tabela 2.2 - Catalisadores bifuncionais e o respectivo potencial para cada reação	24
Tabela 2.3 - Características termodinâmicas das reações mais importantes.	26
Tabela 2.4 - Produtos e respectivos rendimentos numa coluna de HC.....	27
Tabela 3.1 - Correntes com todos os parâmetros colocados	49
Tabela 3.2 - Inputs do processo.....	51
Tabela 3.3 - Alternativa utilizada para nova alimentação	51
Tabela 3.4 - Perfil da carga	53
Tabela 3.5 - Características da coluna	53
Tabela 3.6 - Unidades correspondentes às siglas	55
Tabela 4.1 - Tabela Comparativa dos valores simulados com os reais	68
Tabela 4.2 - Resultados do UCO após aumento da conversão total.....	78
Tabela 4.3 - Resultados dos produtos pesados após aumento da conversão total	78
Tabela 4.4 - Comparação dos Rendimentos	78
Tabela 4.5 - Matriz Correlação com determinadas características.....	88
Tabela 4.6 - Relações com possibilidade de correlação	89
Tabela 4.7 - Resultados da Análise ao R^2	91
Tabela 4.8 - Resultados pormenorizados das correntes	92
Tabela 4.9 - Características da corrente de topo Tabela 4.10- Características da corrente do fundo.....	93
Tabela 4.11 - Características da coluna	94
Tabela 4.12 - Resultados da análise aos pratos.....	96
Tabela 4.13 - Resultados da análise aos diferentes números de pratos.....	96
Tabela 4.14 - Resultados da análise aos diferentes números de pratos do rectifier	97
Tabela 4.15 - Resultados da análise às diferentes posições da alimentação	97
Tabela 4.16 - Resultados da análise às razões de refluxo	97
Tabela 4.17 - Resultados à análise das pressões	98
Tabela 4.18 - Resultados da análise à energia do compressor e balanço de todas as energias utilizadas.....	100
Tabela 4.19 - Resultados da análise aos pratos.....	103
Tabela 4.20 - Resultados da análise aos casos limite	103
Tabela 4.21 - Resultados à análise de pressões.....	104
Tabela 4.22 - Resultados à análise da razão de refluxo.....	107

Abreviaturas

BP - *British Petroleum*
CAPEX - *Capital Expenditure*
CCR - *Conradson Carbon Content*
DSS - *Decision Support System*
FCC - *Fluid Catalytic Cracking*
FCP - *Final Cut Point*
FG - *Fuel Gás*
H₂ - *Hidrogénio*
HC - *Hydrocracker*
HCO - *Heavy Cycle Oil*
IA – *Inteligência Artificial*
ICP - *Initial Cut Point*
IO - *Índice de Octano*
IT – *Informação Tecnológica*
KBC- *Yokogawa Company*
LCO - *Light Cycle Oil*
LPG - *Liquefied Petroleum Gas*
MPDP – *Market Production Data Platform*
OPEX - *Operation Expenditure*
Petronas - *Petroliaam Nasional Berhad*
PR - *Peng Robinson*
RA - *Resíduo Atmosférico*
SRK - *Soave Redlich Kwog*
UCO - *Unconverted Oil*
UOP - *Universal Oil Products*
VGO - *Gasóleo de Vácuo*
WABT - *Weight Average Bed Temperature*

1.Introdução

1.2 Enquadramento e Motivação

A Refinaria de Sines é uma das maiores indústrias a nível nacional no sector petrolífero sendo uma das maiores refinarias na Península Ibérica. Este sector tem vindo a atravessar diversas alterações que se relacionam com a descarbonização da economia e paradigma da mobilidade. Hoje em dia assume assim um comportamento caracterizado por uma enorme complexidade e volatilidade [1].

No sentido de fazer face aos desafios transformacionais desta indústria, passou a existir a necessidade da criação de valor que exige então soluções inovadoras e desenvolvimento de novos negócios [1].

Com o objetivo de tornar a Galp uma empresa mais ágil, flexível e competitiva a área de transformação digital executa a sua estratégia tirando partido das oportunidades que surgem da digitalização a todos os níveis da organização. Nas refinarias têm implementado um extenso programa de automatização e digitalização, melhorando desta forma o desempenho geral e competitividade [2].

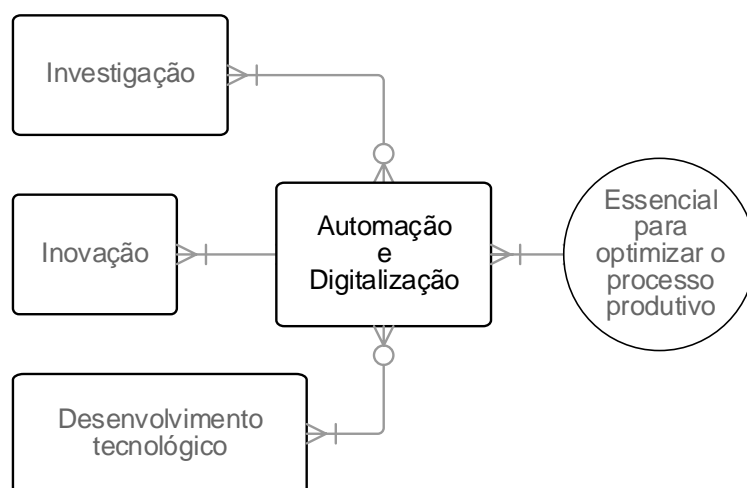


Figura1.1 – Conceito de digitalização.

Desta forma a Galp promove a inovação e o desenvolvimento tecnológico investindo na transição para um modelo de negócio suportado em soluções digitais e sistemas de informação [2].

Neste sentido a Galp aposta no desenvolvimento dos seus colaboradores encorajando a agilidade na tomada de decisão num contexto de elevada complexidade.

A Refinaria contém uma equipa de operadores organizados pelas diferentes fábricas que têm como função monitorizar e controlar as unidades processuais. Estes operadores trabalham diariamente na sala de controlo onde controlam assim todos os processos que ocorrem. A atividade que exercem requer rapidez face à complexidade e segurança do processo pois é necessário controlar as unidades no momento de modo a evitar um possível descontrolo das mesmas. Estas escolhas são efetuadas sem uma atempada previsão dos efeitos das suas ações o que pode originar eventualmente uma resposta menos correta, que não contribui para um maior rendimento da unidade e do processo.

Este trabalho tem como principal objetivo tentar solucionar esta problemática promovendo a agilidade e capacidade de ação na tomada de decisão em situações como as descritas anteriormente.

Este objetivo será alcançado através de uma *digital twin*, ou seja, uma simulação da unidade de HC e FCC que efetue diferentes simulações com diferentes tendências consoante as respetivas entradas dados pelos operadores. Estes inputs serão dados a uma ferramenta online em formato Excel que fará a ligação à simulação.

As respostas fornecidas pela simulação apareceriam para os operadores em ambiente de *Business Intelligence* através de *dashboards*. Na figura 1.2 encontra-se um esquema representativo do que foi referido.



Figura 1.2 - Esquema representativo do objetivo da tese.

As previsões atempadas das ações contribuirão assim para respostas mais ponderadas que podem aumentar a eficiência e por sua vez o rendimento/eficiência da produção. A utilização destas ferramentas permite diminuir a probabilidade de se cometer alguma ação errada.

Este trabalho tem como propósito constituir ferramentas e sistemas de modelação otimizados e fiáveis com capacidade preditiva e adaptabilidade nas áreas de eficiência energética e otimização de processos.

1.3 Refinaria de Sines

A Refinaria de Sines tem uma capacidade atual de destilação de aproximadamente 220 mil barris por dia constituindo desta forma um total de capacidade de refinação de 70% a nível nacional. Esta refinaria abrange na sua área 34 unidades processuais sendo considerada uma das maiores refinarias da Península Ibérica que, em conjunto com a refinaria de Matosinhos perfaz cerca de 20 % da capacidade ibérica [3].

A refinação do petróleo é um processo que tira partido dos diferentes pesos (massa molar), volatilidades e temperaturas de ebulição dos diferentes hidrocarbonetos com o objetivo de os separar, dando origem a produtos intermédios e finais.

As refinarias são normalmente divididas em duas categorias principais[4]:

- Refinarias Simples de *Hydroskimming* - Executam principalmente o processo de destilação, tal como a Refinaria de Matosinhos.
- Refinarias Complexas - Apresentam funções adicionais que consistem num maior aproveitamento dos produtos da destilação, efetuando a conversão das frações produzidas na destilação e o tratamento de produtos intermédios. A Refinaria de Sines é considerada uma refinaria complexa pois contém unidades de *cracking* catalítico e *hydrocracking* tais como o FCC e HC respetivamente [4].

O objetivo das refinarias complexas é geralmente maximizar a produção de gasolina (*cracking catalítico*) e de produtos destilados médios (*hydrocracking*).

A Refinaria de Sines atualmente encontra-se dividida em 5 complexos: fábrica de utilidades, movimentação de produtos, fábrica I, fábrica II e fábrica III.

O gasóleo de vácuo produzido na fábrica I é utilizado como carga às unidades de conversão de *Hydrocracking* e à unidade de craqueamento catalítico em leito fluidizado(FCC). O trabalho desenvolvido nesta dissertação centra-se na unidade de FCC e HC que se encontram na fábrica II e III, respetivamente.

No esquema seguinte encontra-se um diagrama de blocos com a representação do que foi anteriormente referido.

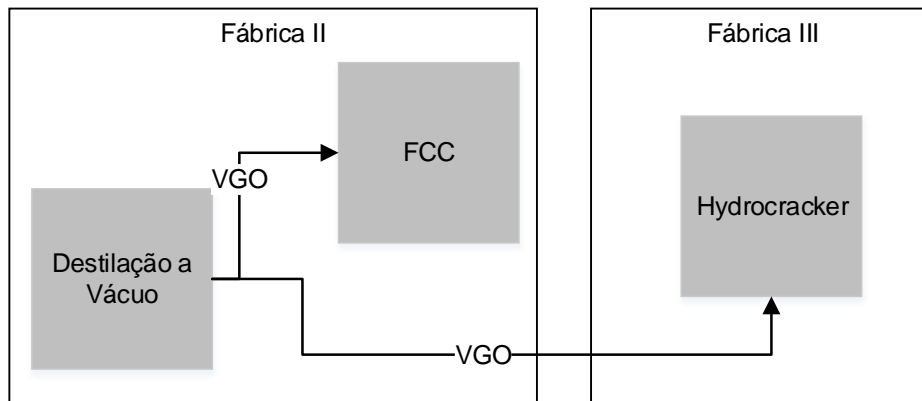


Figura 1.3 – Esquema Geral.

1.4 Objetivos

Os principais objetivos da presente dissertação centram-se nas duas unidades de HC e FCC. Os objetivos que se pretendem completar são os seguintes:

- ✓ Revisão Bibliográfica;
- ✓ Validação e Calibração do HC;
- ✓ Validação e Calibração do FCC;
- ✓ Implementação de *Cat Cooler* no modelo do FCC;
- ✓ Validação do Modelo de FCC com *Cat Cooler*;
- ✓ Utilização de *Data Analytics* para previsão das propriedades da carga à unidade para melhoria do desempenho da simulação
- ✓ Criação de um modelo do *Splitter* de Propileno;
- ✓ Análise de sensibilidade às condições operatórias do *Splitter* de Propileno.

2 Estado de Arte

2.1 Indústria 4.0

Em 1980, Alvin Tofler lançou um livro, “A Terceira Vaga”, onde divide a história da civilização em três grandes revoluções: agrícola, industrial e informação. Neste livro alerta a sociedade para as perturbações que adviriam de “demasiada mudança num curto período de tempo” e anunciou a sensação geral de ansiedade que as pessoas iriam sentir perante a incapacidade de se adaptarem à rápida sucessão de avanços tecnológicos e a quantidade avassaladora de informação e respetiva dificuldade em processá-la prevendo desta forma a indústria 4.0.[5]

A indústria 4.0. foi inicialmente proposta na Alemanha com o objetivo de desenvolver um novo conceito de política económica baseada em estratégias de alta tecnologia. Uma iniciativa estratégica alemã que visava criar fábricas inteligentes onde as tecnologias de fabricação seriam atualizadas e transformadas por sistemas ciber-físicos. a “Internet das coisas” e a “computação na nuvem”. A I4.0 tornou-se até há relativamente pouco tempo uma realidade devido aos avanços tecnológicos da última década, aliados às tecnologias em desenvolvimento nos campos de tecnologia da informação e engenharia. Após esta iniciativa alemã diversos países se seguiram tais como os Estados Unidos da América, o Japão, a república da Coreia, a China e Taiwan atribuindo diferentes nomes, mas sempre com a mesma linha de pensamento [6].

Contextualizando existiram 4 revoluções industriais, a primeira teve início no final do século dezoito e foi caracterizada pela introdução de água e da potência do vapor nas suas instalações de fabrico. Posteriormente surgiu a segunda revolução industrial que começou no início do século vinte e a principal mudança foi o trabalho da produção em massa baseada em energia elétrica. Por fim a última revolução começou aproximadamente na década de 1970 e foi determinada pela produção automatizada [7].

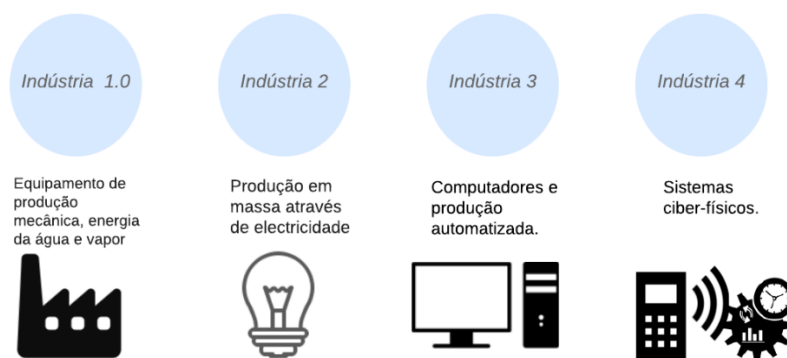


Figura 2.1 - Evolução das Revoluções Industriais adaptado de [70].

Como referido anteriormente as indústrias foram-se desenvolvendo ao longo dos anos ultrapassando diferentes revoluções industriais até que culminaram na indústria 4.0.

Uma das principais razões pela qual se chegou até esta revolução industrial foi a intensa estrutura de custos aliada ao facto do mercado ser bastante competitivo, com uma preocupação constante de sustentabilidade económica, financeira e ambiental que potencia a diminuição de margens de lucros. Este fator afeta a competitividade entre as fábricas em todo o mundo, de acordo com o relatório de Boston *Consulting Group* os três principais exportadores mundiais são a China, a Alemanha e os Estados Unidos da América [6].

A China foi considerada o maior exportador seguido da Alemanha que apresenta um custo de fabricação particularmente maior do que os outros países. Os EUA foram considerados o terceiro grande exportador tendo como vantagem menos custos de energia, produtividade e apenas um

pequeno aumento comparado com a China na mão-de-obra. Desta forma os custos de fabricação da China e EUA estão equiparados e devido ao aumento substancial na China dos custos de energia e mão-de-obra os EUA começam gradualmente a ameaçar a posição da China neste monopólio [6].

R. Bock et al [8] desenvolveram um estudo no qual concluíram que havia um desempenho bastante melhor por parte das empresas que adotaram a era da digitalização, obtendo margens de lucros líquidos maiores que as organizações que não adotaram da mesma forma a mudança. Traduzindo este estudo para números é importante referir que ao fim de 3 anos a margem bruta das empresas que adotaram a digitalização era maior em 17%, e a margem de lucro era maior em aproximadamente 5%.

O surgimento da I4.0 fornece uma oportunidade de reestruturação e desenvolvimento global da economia que evolui neste sentido para a sustentabilidade [6].

Estes conceitos lançaram a quarta revolução industrial caracterizada pela tecnologia que inclui sistemas ciber-físicos, a Internet das coisas e a Internet dos serviços. Todas as áreas referidas anteriormente têm em comum a comunicação através da internet que promove uma interação e troca de informação entre humanos, máquinas e ainda entre as próprias máquinas.

O conceito de digitalização na I4.0 tem como principal domínio os sistemas de informação de dados. A I4.0 adota tecnologias digitais para recolher dados que eventualmente até podem ser em tempo real e analisá-los, fornecendo desta forma informações úteis para um maior conhecimento, posteriormente um planeamento e a gestão da produção [9].

Medidas como estas aumentam a eficiência dos processos o que contribui deste modo para a sustentabilidade da empresa [10].

A figura 2.2 demonstra os diferentes níveis de maturidade da indústria 4.0 e a maneira como a mesma evoluiu ao longo do tempo. Inicialmente ainda na indústria 3.0 os últimos passos são a automação e conectividade evoluindo assim em direção à indústria 4.0.

Neste processo cada estágio baseia-se no anterior e descreve os recursos necessários para atingi-lo e os benefícios resultantes para a empresa.



Figura 2.2 – Níveis de Maturação da Indústria 4.0.[71].

O primeiro estágio da indústria 4.0, ou seja, o 3º deste processo, relaciona-se com *Business Intelligence* com o principal objetivo de observar o que acontece. Em relação ao 2º, 3º, 4º estágios relacionam-se respetivamente com *Big Data Science*, Análise Preditiva e Infraestruturas autorreguladas. Estas novas tecnologias surgem com o objetivo final de saber o que acontece, porque é que acontece, estar preparado para o que vai acontecer e por fim e conseguir otimizar autonomamente.

2.1.1 Digitalização no Mundo

A indústria 4.0 aliada à digitalização surge desta forma para melhorar a performance, eficiência dos processos de fabrico o que posteriormente se traduz numa contribuição também para a sustentabilidade da empresa. Deste modo a implementação deste tipo de tecnologias trará vantagens para uma empresa, seguem-se exemplos de empresas que adotaram algumas tecnologias e respetivos benefícios que conseguiram obter.

A **Shell**, empresa petrolífera anglo-holandesa, atualmente trabalha com computadores de alta *performance* que ajudam a detetar novos recursos de energia nas profundezas da superfície da Terra. A tecnologia *Smart Fields* utiliza sistemas de deteção digital que aumentam a quantidade total de *Oil* recuperado de um campo até 10% e gás natural em 5% [11].

Atualmente reduziram o tempo de simulação do inventário das unidades de 48 horas para menos de uma hora, e inclusive os utilizadores conseguem obter respostas em tempo real [12]. Em 2016 lançaram o primeiro robot móvel apto para trabalhar em ambientes hostis e difíceis [13].

A **BP** foi a primeira empresa autorizada a utilizar drones (ou VANT-Veículo aéreo não tripulado) para patrulhar os campos de petróleo que detém no Alasca. Estes drones são usados para monitorar atividades de manutenção específicas em estradas, oleodutos e outras infraestruturas. Adicionalmente foi projetado para recolher dados tais como fotografias e informações de sensores, efetuar ainda medições volumétricas de precisão e análise topográfica [14].

Atualmente encontram-se a efetuar um grande investimento para adquirir algumas soluções de IA de nível industrial para alcançar novos níveis de perceção operacional, de otimização do negócio e automação de processos em todas as operações [15].

A **Repsol** contém um plano de digitalização com um orçamento de 150 milhões que se prevê ter um retorno em 2022 de 1 bilhão que inclui 130 projetos. A proposta consiste em fornecer às equipas centros de controlo remoto para apoiar e supervisionar operações em todo o mundo para garantir níveis mais altos de segurança e eficiência na produção, controlando digitalmente todos os aspetos das instalações industriais. Relativamente à parte industrial a Repsol tenciona investigar novos produtos digitais móveis que criem novas formas de colaboração entre supervisores e trabalhadores por fim também se tenciona implementar computação mais sofisticada [16].

Segundo o CEO da **Total**, Patrick Pouyanné, a empresa petrolífera com sede em Paris, encontra-se neste momento a investir na digitalização a nível dos negócios de energias alternativas tais como energia solar, focando-se em desenvolver painéis solares com um sistema inteligente que auxilia a gerir o consumo [17].

2.1.2 Tecnologias da Indústria 4.0

A combinação da *Internet of Things* e de *Clouds* permite a conexão de diferentes equipamentos e a recolha de uma grande quantidade de dados cujo resultado se traduz no que se designa *Big Data*.

Big data consiste basicamente numa recolha de dados de sistema e objetos através de sensores de leitura ou medidores. Juntamente com *analytics* contribui para um dos maiores impulsionadores da quarta revolução industrial devido ao facto de poder gerar e mover imensa informação. Na figura 2.3 encontra-se um esquema dos diferentes conceitos da indústria 4.0.

A análise desta informação, por sua vez, fornece capacidade preditiva avançada, identificando eventos que podem afetar a produção, o que pode resultar em otimização na tomada de decisão e adicionalmente em todas as decisões de uma fábrica [10].

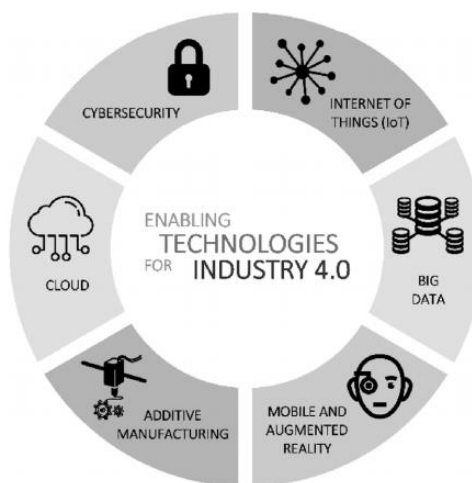


Figura 2.3 – Tecnologias da Indústria 4.0 [10].

2.1.3 Business Intelligence

Apesar de não ser uma inovação recente uma das principais tecnologias da I4.0. denomina-se *Business Intelligence*.

A recolha e análise de dados está no core do *Business Intelligence* há já alguns anos, no entanto este conceito de *Business Intelligence* tradicional foi modificado e adaptado à imensidão de dados que caracteriza a I4.0.[18]. Na figura 2.4 surge um esquema simples, mas representativo do conceito de BI.

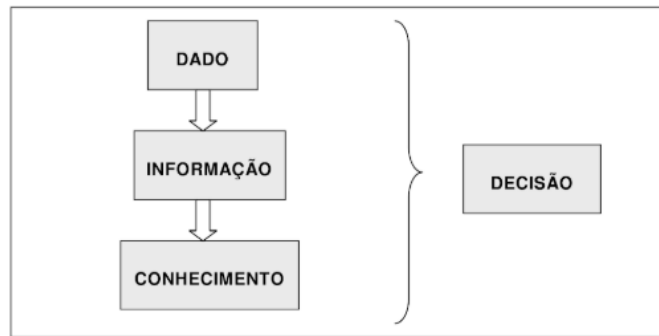


Figura 2.4 – Esquema simplificado do Conceito de *Business Intelligence* [24]

O mercado de sistemas de BI e de *analytics* cresceu 11,7%, traduzidos em 21.6\$ bilhões de dólares em 2018. As plataformas de BI continuam a ser o segmento que cresce mais, com 23.3%, seguidas pelas plataformas de *data science* com crescimento de 19% [19].

Está previsto até ao final de 2020 o mercado de BI chegar aos 22.8\$ bilhões. A moderna plataforma de BI surgiu nos últimos anos para atender aos novos requisitos organizacionais de acessibilidade, agilidade e percepção analítica mais profunda. Esta nova tecnologia mudou o mercado de relatórios de sistema de registo anteriormente liderados por IT para relatórios ágeis e liderados por negócios, incluindo análises automáticas [20].

Os sistemas de *Business Intelligence* representam instrumentos que facilitam a aquisição, o processamento e a análise de grande quantidade de dados com diferentes origens e que servem como uma base sólida para descobrir novo conhecimento, na figura 2.5 encontra-se um ciclo que demonstra as diferentes etapas de BI.



Figura 2.5 – Esquema adaptado do sistema de *Business Intelligence* [23].

A função principal de *Business Intelligence* é obter interfaces que facilitem ao gestor a interação e a compreensão dos dados com o objetivo final de fornecer informação para uma adequada tomada de decisão. De uma forma geral as aplicações de BI traduzem o acesso aos dados de uma forma simples, sem grande complexidade e mais atrativa, um exemplo disso são as *dashboards*, tabelas, gráficos e ferramentas iterativas de análise [21]. Na figura 2.6 encontra-se mais pormenorizado todo o sistema de BI.

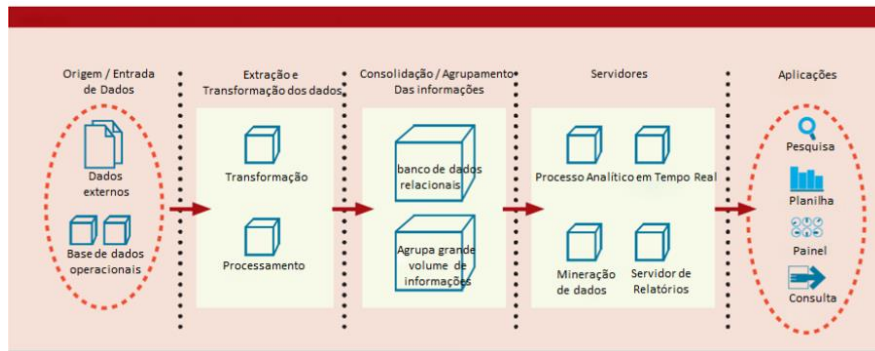


Figura 2.6 – Arquitetura BI [25].

Numa pesquisa entre 510 empresas encontrou-se como benefícios do BI: [22] [23]

- Economia de tempo devido à rapidez das tomadas de decisão;
- Capacita analistas e gerentes com uma única versão da verdade;
- Melhores estratégias e planos devido ao reconhecimento das vantagens mais competitivas;
- Melhores decisões táticas devido às ações baseadas em factos;
- Processos mais eficientes;
- Economia de Custos.

Para além dos benefícios efetivamente BI ajuda a alinhar a organização em direção aos seus principais objetivos, durante este processo há ainda a possibilidade de encontrar problemas pois criam-se cenários de informação que de outra forma não seria possível visualizar/detetar [23].

Através destes cenários é ainda possível obter respostas, pois surgem questões que não se sabia que existiam até se olhar verdadeiramente para os dados [23].

Business Intelligence é um conceito de grande importância para as empresas pois suportam e apoiam nas tomadas de decisão aumentando a qualidade das mesmas através da disponibilização da informação útil [21].

A I4.0 é principalmente conhecida pela utilização da tecnologia e eletrónica da informação e pelos processos completos de automação e digitalização [9].

Uma das principais metas da I4.0 é alcançar um nível avançado de eficiência operacional e produtividade, tal como um nível avançado de automatização [7].

Esta meta pode ser atingida transformando uma fábrica normal numa fábrica inteligente que integra computação autónoma e comunicação máquina-máquina. Esta nova meta permite assim um melhor controlo do processo de fabricação [18].

Segundo F. V. Primak em [24] para a implementação de BI aparentemente existem seis passos de uma forma geral para tornar a execução bem-sucedida:

- **Identificação:** Identificar as necessidades que vão ser utilizadas, estas devem ser efetivamente pertinentes para os objetivos e estratégias;
- **Verificar** as bases de dados da empresa e se necessário mapear a informação já existente;
- **Recolher e carregar** os dados para criar uma base multidimensional é de realçar que é importante garantir que todas as informações são consistentes;
- **Escolher a ferramenta** de apresentação para visualizar e analisar as informações resultantes da etapa anterior;
- **Efetuar relatórios** com vista a obter insights sobre os indicadores chaves de desempenho;
- **Planear** uma implantação de forma a garantir que a informação adequada chega quando e onde for necessária.

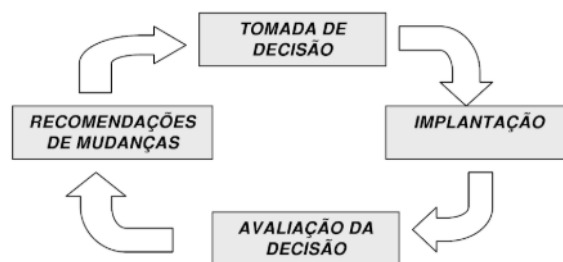


Figura 2.7 – Aplicação de *Business Intelligence* [24].

Atualmente as empresas estão a caminhar na direção dos processos de tomada de decisão através de BI que representa com os seis passos anteriores, tecnologias e métodos para seguir a melhor estratégia de mercado.

Os sistemas de *Business Intelligence* fornecem vários recursos para a gestão da qualidade do processo tais como: [25]

Análise: Possibilita a análise dos diferentes processos e áreas de negócio.

Previsão: Através de modelos de previsão e aplicação destes modelos, para posteriormente identificar comportamentos indesejados e a possibilidade de efetivamente aplicar na realidade os modelos.

Monitoramento: Capacidade de monitorar e analisar testando variáveis e por fim informar sobre situações inusitadas ou indesejáveis. Existe a possibilidade de definir situações de alerta ou críticas mesmo com o objetivo do sistema poder notificar.

Controle: Através do monitoramento o sistema pode interagir com o *Business Plan Management* para evitar e tentar reduzir o impacto das ações.

Otimização: É possível ainda identificar áreas de melhoria nos processos.

Uma das principais vantagens da implementação da análise preditiva é a capacidade de antecipação do futuro, ou seja, com informação adicional existe a possibilidade de antecipar o futuro tomando melhores decisões que potenciam a redução de problemas e promovem a segurança e sustentabilidade.

Esta capacidade de antecipação dos eventos proporciona uma capacidade de resposta rápida e eventualmente uma minimização de custos e maximização de margem de lucro.

Segundo a Forbes estima-se que o objetivo mais popular entre empresas em 2019 é usar BI de forma a melhorar as suas receitas. Dashboards, relatórios, visualização avançada do usuário final são as iniciativas de BI mais estratégicas utilizadas pelas empresas atualmente. Sectores como os de operações, finanças, management e vendas estão desta forma a impulsionar a adoção de BI [26].

2.1.4 Dashboards

As tomadas de decisão através de BI podem assumir a forma de *dashboards*, que facilitam na clareza, percepção e interpretação dos resultados necessários para alcançar um ou mais objetivos [27].

De forma geral espera-se que as *dashboards* recolham, sumerizem e apresentem a informação, rapidamente, possibilitando ao utilizador verificar a performance de alguns indicadores dispostos numa tela. O conceito é no fundo apresentar as informações de modo rápido e generalizado [27].

Esta interface gráfica oferece desta forma uma solução no sentido de minimizar a sobrecarga de informações pois apresentam os indicadores de *performance* mais importantes [27].

O desenvolvimento de IT desempenhou um papel crucial no desenvolvimento de *dashboards* pois forneceu as infraestruturas para contruí-las de forma relativamente eficiente tendo por base o conceito de BI [28].

Através das *dashboards* a informação surge de forma integrada, e devido ao facto de ser considerado um sistema de suporte à decisão fornece informações num formato bastante específico para o utilizador. Obviamente as dashboards necessitam de ser avaliadas de acordo com o seu design e maneira como interagem com o utilizador que fará as decisões no sentido de facilitar a compreensão. Este estudo é feito no sentido de adequar a *dashboard* ao seu propósito, inclusive até pode ter algum alerta no sentido de avisar de uma ocorrência irregular [27]. Na figura 2.8 encontra-se um esquema dos diferentes passos na construção de uma dashboards [60].

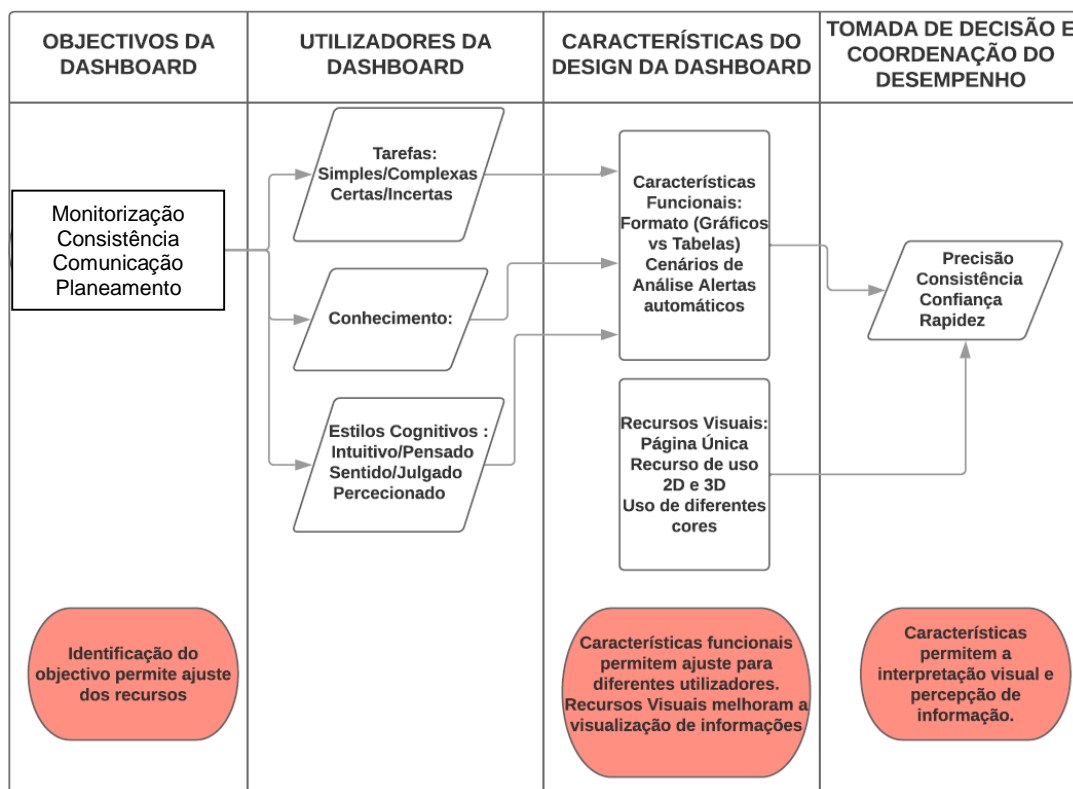


Figura 2.8 – Esquema adaptado dos diferentes passos na construção de uma *dashboard* [64].

No geral, os requisitos das novas gerações de *dashboards* têm como objetivo alinhar processos com informações mais relevantes usando recursos visuais e intuitivos de fácil compreensão [27].

De acordo com J. Boyer et al[29] as empresas deveriam poder monitorizar as principais métricas usando *dashboards* para constituir relatórios e analisar dados para entender o contexto, captar tendências, prever resultados futuros e detetar anomalias.

A intenção do BI é então tentar achar conexões lógicas entre causa e efeito para que os problemas/situações possam ser resolvidos proactivamente. As *dashboards* são a tecnologia que explicita as mesmas conexões nos números das empresas, podendo ser utilizadas por operadores para verificar o estado da unidade fabril ou até gestores para toma de decisões estratégicas [27].

BI oferece o “suporte” para as informações associadas ao desempenho e estratégia, reduzindo significativamente o excesso de informações, que por sua vez, diminuí o número de ferramentas de coordenação que é necessário usar hoje em dia [28].

No geral, os sistemas de BI são *Decision Support Systems* com dados orientados, ou seja, um conjunto de conceitos e métodos para melhorar a tomada de decisões de negócio usando sistemas de suporte [28]. Os DSS têm como objetivo obter decisões otimizadas de maneira robusta para produtos e/ou processos, ou seja, soluções ideias e relativamente insensíveis à incerteza.

F. Siraj et al[30]. mostra como a PETRONAS tem um fabricante que desenvolveu uma *dashboard* com o objetivo de facilitar a tomada de decisão pelos administradores tornando-a assim mais rápida. Esta *dashboard* é utilizada como plataforma principal para integrar dados de diferentes departamentos, processar várias informações e comunicar entre departamentos para que no fim a administração possa tomar decisões rápidas. Uma *dashboard* é considerado algo com imenso potencial, e uma poderosa interface do usuário que deve incluir medidores, gráficos e indicadores. Uma *dashboard* funciona exatamente como uma tela que fornece informações relevantes e análises críticas de negócios que permitem uma tomada de decisão mais rápida e eficaz.

Uma variedade de metodologias e estruturas de DSS foram desenvolvidas com aplicativos do mundo real. No entanto no caso das refinarias de petróleo existe uma particularidade pois as refinarias caracterizam-se por inputs variáveis e condições de mercado que torna particularmente desafiante o desenvolvimento de uma DSS.

Com base nas decisões de negócio dos sistemas de refinação Chryssoloouris et al. [12] apresentam uma abordagem baseada numa simulação para resolver o problema de refinação a curto prazo. A abordagem é capaz de lidar com variáveis de decisão discretas num curto processo de tomada de decisão. Jackson et al. [12] utilizaram otimização não linear no planeamento do local de produção de várias plantas, onde modelos não lineares são usados no nível da planta para determinar os níveis mensais de produção e stock para atender às previsões e maximizar o lucro. Estes dois autores concentram-se mais em decisões de negócio, no entanto, os modelos de otimização para decisões de engenharia são extremamente importantes.

Neste caso, sob a estrutura de suporte à decisão a *dashboard* serve como interface humano-computador que permite ao operador que toma a decisão ajustar variáveis de decisão e trocar informações com o DSS. Para um dado conjunto de variáveis de decisão, o DSS simula o desempenho de engenharia da refinaria em função das variáveis de decisão. Com a ajuda da *dashboard* o operador pode interagir, ajustando os valores até atingir determinados objetivos onde o desempenho desejado seja alcançado. Para simular este desempenho é necessário desenvolver um modelo de simulação de refinaria de forma a simular o desempenho comercial e de engenharia.

2.2 Modelos Simulação Processual

As indústrias hoje em dia encontram-se em constante mudança devido à dinâmica do mercado, em função disso, projetam-se fábricas para se atingir um desempenho ótimo com um risco reduzido de repetir ou gerar mais trabalho, devido aos estudos de simulação. Adicionalmente as preocupações ambientais globais forçaram as indústrias automotiva e de petróleo a aumentar a sua eficiência e reduzir as emissões, o que levou a restrições de combustíveis em todo o mundo.

A implementação de combustíveis de transporte com baixo teor de enxofre tornou-se uma tendência mundial com um crescimento súbito. Para conseguir estes padrões é exigido se tome decisões antes da data de implementação

Os estudos de simulação e controlo são amplamente utilizados em operações de processos químicos, tendo existido um aumento considerável na aplicação de técnicas computacionais.

Os engenheiros que trabalham com estas simulações podem facilmente usar técnicas mais profundas de análise e síntese [31].

A KBC tem a metodologia e as técnicas para avaliar a configuração da refinaria existente, a capacidade da unidade e infraestrutura da instalação para fornecer a base na tomada de decisão. A metodologia referida é alcançada através do Petro-SIM™ que desenvolve modelos não lineares detalhados e representativos da refinaria [32].

O Petro-SIM™ é o principal software de simulação de processos e a plataforma de otimização que impulsiona a excelência no desempenho das indústrias de hidrocarbonetos tais como petroquímica e refinação. Este simulador é utilizado para processos de *upstream*, *midstream*, *downstream* ou processos petroquímicos [33].

Sendo uma plataforma de processos que envolvem as indústrias dos hidrocarbonetos os modelos de simulação são bastante específicos da indústria [34].

A tecnologia do Petro-SIM™ fornece modelos de simulação rigorosos tornando-se uma ferramenta preditiva e analítica eficaz [33].

O Petro-SIM™ fornece maneiras fáceis e eficientes de aceder ao que é mais relevante, economizando tempo, através das opções de configuração que permitem configurar facilmente a simulação introduzindo as listas de componentes apropriados e os pacotes de propriedades relevantes [34].

O Petro-SIM™ é o primeiro simulador de processo que permite executar um modelo estacionário em diferentes pontos no tempo usando vários conjuntos de dados de entrada dependentes do tempo. Desta forma podem ocorrer processos de verificação de desvios dentro de uma única simulação [34].

Com todas as tecnologias inerentes ao Petro-SIM™ é possível desenvolver simulações de processos que são usadas posteriormente em *digital twin*'s. As simulações são parte integrante das dashboards e estão conectadas à *dashboard* o que permite apresentar mais facilmente as informações das simulações na dashboards[35].

As simulações são capazes de prever desempenhos para um determinado conjunto de variáveis e parâmetros de decisão. Por esta mesma razão é desejável conectar modelos de simulação e efetuar esta interface de forma a alcançar a decisão ideal [35].

Segundo Almansoori et al [35] ao integrar simulações numa *dashboard*, constituiu-se um modelo de otimização robusto que permite desta forma obter melhores decisões. Com os modelos é possível ajustar na *dashboard* as variáveis que se querem monitorizar, com o objetivo de as mesmas culminarem num desempenho desejado apresentado nas dashboards [35].

2.2.1 Integração com Microsoft Excel

O Petro-SIM™ fornece ainda uma extensa integração com o Microsoft Excel, que facilita a transferência de dados(*workbook*). Através da folha de Excel gere-se dados para diferentes casos, ao mesmo tempo

todas as ações são efetuadas no Petro-SIM™ através de uma das opções do Excel. Esta funcionalidade permite configurar dados de entrada para uma simulação à medida que se verifica o conjunto de resultados da mesma o que permite comparar os diferentes casos [34].

A necessidade de detetar e avaliar informações nas empresas está a aumentar consideravelmente, devido a leis, padrões e diretrizes mais restritas mas também pelo facto das empresas quererem ter acesso a informações que potenciem e aumentem a eficiência [36].

O Microsoft Excel é frequentemente usado para o efeito devido à simplicidade na recolha e análise de dados e processamento dos mesmos. O Excel contém um ambiente bastante familiar sendo utilizado em várias aplicações como software para o planeamento de recursos [36].

A integração do Microsoft Excel surge então criando uma integração rápida e fácil de qualquer outra nova ferramenta nas simulações e processos [36].

2.2.2 Modelos Termodinâmicos-Pacotes de propriedades do Petro-SIM™

Este modelo é particularmente utilizado e recomendado em unidades de refinaria tais como unidades de gás, destilações de crude e unidades de etileno.

Em programas de simulação ao utilizar o *property package* adequado resulta uma simulação com sucesso visto que os efeitos da pressão e temperatura podem alterar drasticamente a precisão da simulação produzindo parâmetros ausentes ou ajustados para outras condições.

Inicialmente verifica-se se os componentes são todos gases ou apolares, se assim for, existem duas alternativas, o modelo termodinâmico *Peng-Robinson* ou o *Soave Redlich Kwong*. O PR é adequado para misturas apolares ou ligeiramente polares, por exemplo dióxido de carbono, sulfureto de hidrogénio e hidrogénio, particularmente adequados nas regiões de alta temperatura e alta pressão [37].

Adicionalmente sabe-se que o PR tem um maior desempenho em gases do que o SRK [38].

O Peng-Robinson é adequado para qualquer temperatura e pressão contrariamente ao modelo de SRK que é adequado para qualquer pressão, mas a temperaturas não tão extremas (*non cryogenic*). A PR tem melhor desempenho para sistemas de gás e condensado em comparação com o SRK [39].

Através destas evidências, da sua ampla utilização no sector de petróleo, e de uma pesquisa pela literatura existente, confirma-se a seleção do modelo de PR como o mais correto sendo o mesmo apropriado para misturas apolares ou ligeiramente polares, tais como misturas de hidrocarbonetos e gases leves [39].

Este modelo de equação de estado é utilizado para uma variedade de sistemas em uma ampla gama de condições, resolve sistemas monofásicos, bifásicos e trifásicos com alto grau de eficiência e confiabilidade [39].

Este modelo representa com precisão as relações temperatura, pressão e composições de fases em interações binárias. Os parâmetros devem ser expressos em propriedades críticas, como a pressão e temperatura e definir o fator acêntrico [38].

É de realçar que é ideal para cálculos de equilíbrio vapor-líquido bem como para o cálculo de densidades para sistemas de hidrocarbonetos. A previsão da densidade melhora nesta EOS, apesar de não poder descrever o comportamento volumétrico em torno do ponto crítico. O surgimento deste mesmo modelo foi devido ao SRK falhar quando era necessário prever densidades líquidas com precisão [39].

2.2.2.1 Equações de estado

A equação de estado de PR foi desenvolvida com o objetivo de lidar com as propriedades de vapor e líquido perto do equilíbrio, para isto desenvolveu-se uma nova equação com vários parâmetros de ajuste [38].

Equação 2.1

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{aa}{V(V + b) + b(b - V)}$$

Na equação 2.1. P,V e T representam pressão, volume molar e temperatura absoluta, R é a constante dos gases e por fim a e b representam parâmetros da equação relacionados com a força de atração intermolecular e volume das moléculas. Os restantes parâmetros encontram-se nas equações seguintes [38].

Equação 2.2

$$a = 0.45724 \times \frac{(RT_c)^2}{P_c}$$

Equação 2.3

$$a = [1 + S (1 - \frac{T}{T_c})]^2$$

Equação 2.4

$$S = 0.37464 + 1.54266w - 0.26992w^2$$

Equação 2.5

$$b = 0.07780 \frac{RT_c}{P_c}$$

Onde T_c, P_c são as pressões e temperatura críticas. Se o valor do fator acêntrico(w) > 0.49 a expressão utilizada é alterada e utiliza-se a seguinte:

Equação 2.6

$$S = 0.3796 + 1.4850w - 0.1644w^2 + 0.01666 w^3$$

A equação prevê a pressão de vapor de hidrocarbonetos pesados numa ampla gama de temperaturas [38].

Equação 2.7

$$P = \frac{\rho NRT}{(1 - b\rho)} - \frac{a\rho^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2}$$

Equação 2.8

$$a = a_c w$$

Equação 2.9

$$a_c = 0.45724 \times \frac{(RT_c)^2}{P_c}$$

Equação 2.10

$$\rho = [1 + k (1 - T_r)]^2$$

Equação 2.11

$$T_R = \frac{T}{T_c}$$

Equação 2.12

$$b_i = 0.0778 \frac{RT_c}{P_c}$$

Equação 2.13

$$k = 0.37464 + 1.54226w - 0.26992w^2$$

2.2.3 Introdução às Estratégias

Os modelos de simulação são cada vez mais utilizados e para os usuários do mesmo é importante verificar se o modelo e os respetivos resultados estão corretos, pois as informações obtidas destas simulações são utilizadas inclusive em tomadas de decisão. Para obter segurança e confiança nos modelos é importante efetuar um procedimento de validação e calibração antes dos mesmos serem utilizados [40],[41].

2.2.4 Estratégia de Validação

A validação é um processo de determinação do grau em que o modelo é uma representação precisa do mundo real relativamente à perspectiva dos usos pretendidos do mesmo. A validação verifica se os *outputs* da simulação são consistentes com o conceito do modelo [42].

Um modelo de simulação nunca consegue traduzir na totalidade os complexos fenómenos físicos que ocorrem. Devido a este facto podem resultar previsões da simulação erradas, que no fundo não representam perfeitamente a realidade.

A validação surge então como processo de comparação do modelo e do seu comportamento com a realidade, ou seja, avalia a concordância dos resultados da simulação com os dados da realidade [43].

As métricas de validação aplicadas tradicionalmente concentram-se em um ou mais pontos operacionais em estado estacionário. No entanto existem diferentes tipos de validação baseados na qualidade da mesma, os mesmos estão representados na figura 2.9.

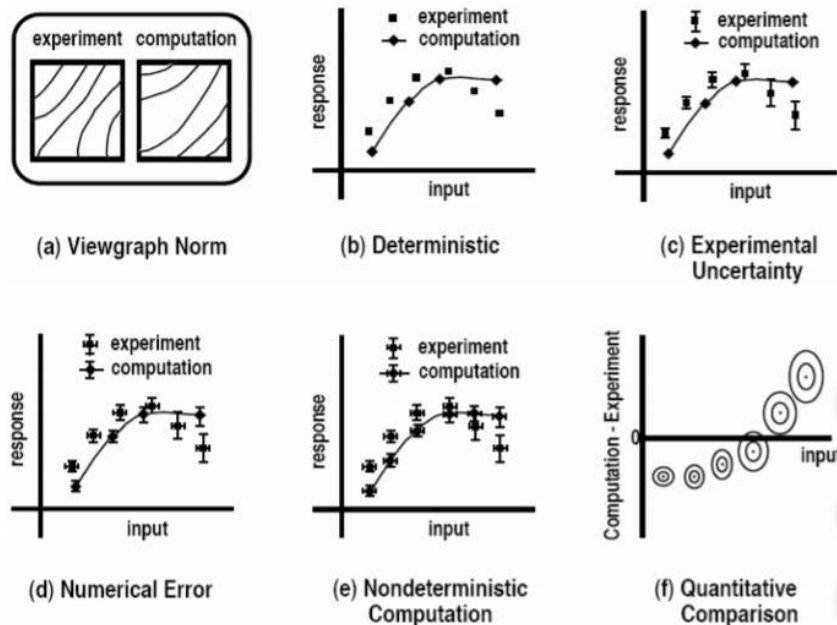


Figura 2.9 - Aumento da qualidade de validação

O tipo mais comum de validação é o demonstrado no gráfico b que compara resultados calculados e medidos sem mostrar informações adicionais sobre os intervalos de incerteza [43].

As restantes figuras mostram níveis crescentes de validação, por exemplo na figura e) e f) basicamente apresentam-se as mesmas informações mostrando as incertezas nas medições e simulações [43].

O comportamento dinâmico da simulação é avaliado em regra geral qualitativamente e não quantitativamente [43].

2.2.5 Estratégia de Calibração

Com o modelo validado o próximo passo é a calibração do mesmo, contrariamente à validação, é um processo de ajuste numérico ou de parâmetros físicos da modelação, com o objetivo de melhorar a proximidade com os dados reais. O processo de calibração passa por efetuar uma “correção” dos valores das variáveis do modelo responsáveis pela representação das condições de operação.

Esta fase é particularmente importante para a conformidade entre os resultados simulados e os dados reais que foram obtidos.

Para melhorar significativamente este nível de conformidade podem-se ajustar alguns parâmetros incertos do modelo de simulação, no entanto, a calibração do modelo pode resultar em valores corretos pelo motivo errado. Desta forma é necessário verificar com precaução as alterações que se efetuam, por sua vez, é importante alterar variáveis adequadas para as quais as variáveis de saída são sensíveis.

Se efetivamente se alterar as variáveis que tenha um impacto positivo nos resultados consequentemente o cenário global melhora.

A calibração pode ser efetuada em 3 diferentes fases que estão mais explícitas na figura 2.10 [42].

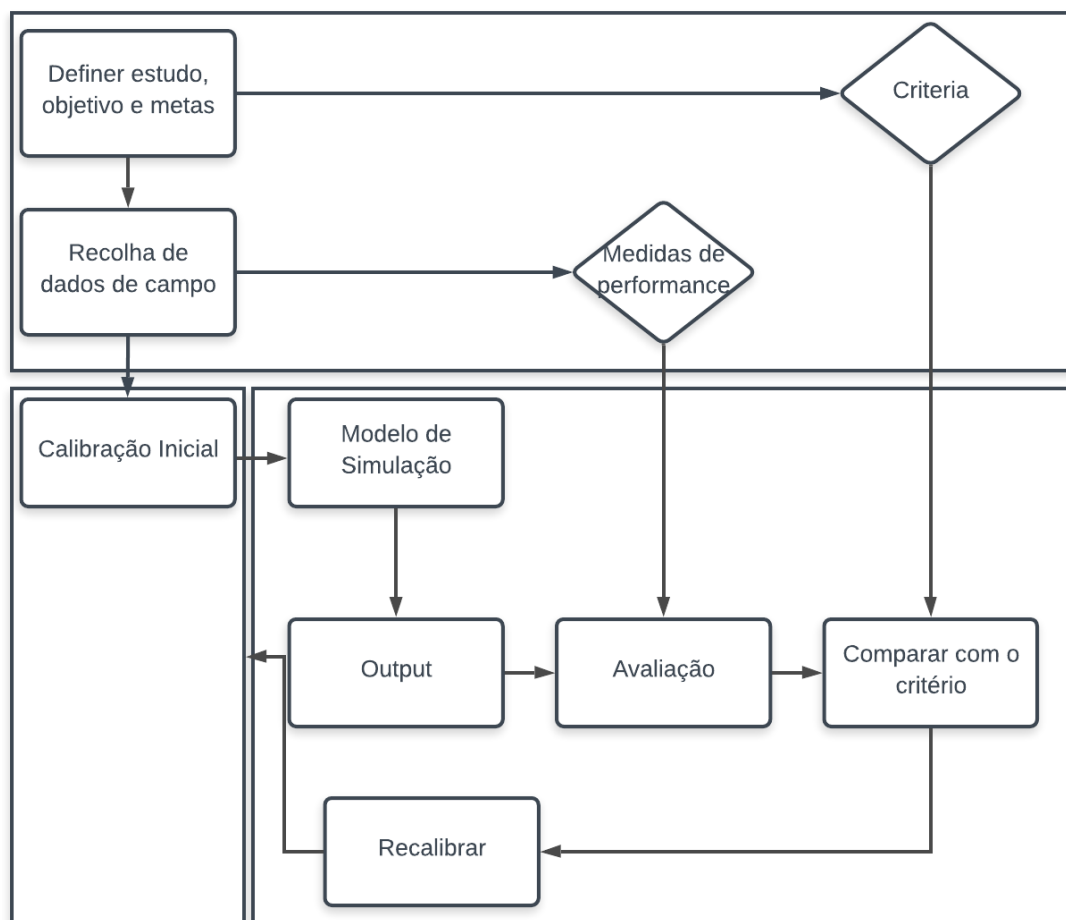


Figura 2.10 – Esquema das 3 etapas da calibração adaptado de [42].

A calibração passa assim por aproximar o modelo à realidade e verificar essa aproximação através das medidas de desempenho resultantes do modelo com as do sistema real de modo a verificar a fiabilidade do mesmo.

A calibração de certa forma envolve a otimização de um subconjunto de parâmetros do modelo para melhorar o ajuste das previsões do modelo aos dados empíricos [44].

Os processos aqui referidos, tanto o de validação como o de calibração, melhoram a qualidade das previsões dos dois modelos de simulação. Esta melhoria garante que o modelo de simulação possa ser usado corretamente para os objetivos da presente dissertação [43].

É de realçar que ambos os processos têm o seu processo iterativo com reanálises sucessivas.

2.3 Data Science-Breve introdução à Programação em R

A evolução tecnológica e o aumento da dependência das organizações pela Internet levaram a um crescimento da variedade e volume de dados existentes, dados estes que se podem denominar *Big Data*. A dimensão dos dados levou à busca de ferramentas e tecnologias que possam analisar os mesmos fornecendo insights destes dados.

A análise destes dados possibilita a identificação de novos padrões e exploração de questões que se podem tornar pertinentes e criar assim valor para a empresa.

Prevê-se que a tendência de crescimento do volume de dados aumente durante os anos tais como se encontra na figura 2.11.

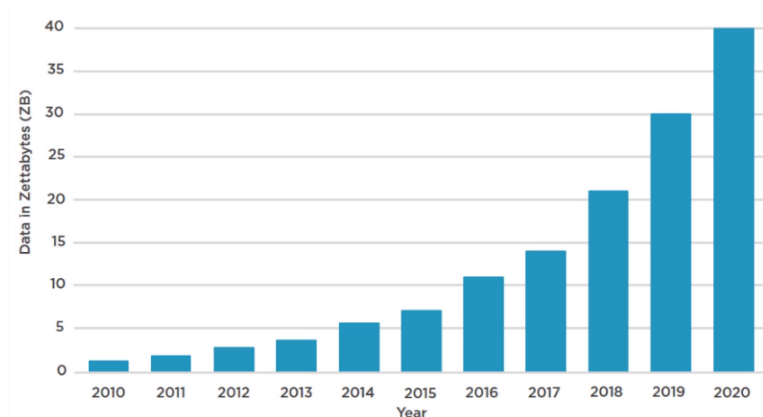


Figura 2.11 - Crescimento Global de Dados [45].

A área cujo objetivo é transformar dados em conhecimento denomina-se *Data Science* e consiste em 3 áreas que estão relacionadas entre si como ilustra a figura 2.12.

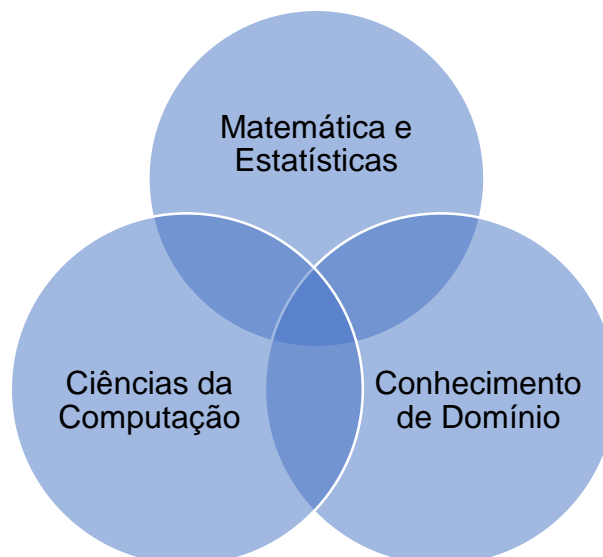


Figura 2.12 - Esquema da programação em R.

Nesta área e particularmente nesta fase pretende-se aplicar diversas ferramentas para transformar os dados em gráficos interpretáveis.

A linguagem de programação R é hoje em dia uma das linguagens mais utilizadas em todo o mundo que apresenta como uma das maiores vantagens a vasta oferta de pacotes de técnicas estatísticas [54].

Em 2015 a linguagem R era juntamente com *Phyton* as 3ª ferramentas mais utilizadas de *Data Science* juntamente com *Phyton*, ultrapassadas apenas por *Structured Query Language* e pelo Excel [45].

A linguagem R conta com um apoio online e uma abundância de pacotes lançados publicamente que podem ser adquiridos para entender as capacidades da linguagem. Estes fatores contribuem para o facto do R ser ótimo para a execução de complexas análises de dados exploratórios [46].

A linguagem R atua neste sentido como um sistema expedito que permite aproximar as propriedades da carga a qualquer momento no sentido de maximizar a performance da simulação.

2.4 Splitter de Propileno

O propileno é um dos principais produtos da indústria petroquímica, sendo um dos componentes mais produzidos globalmente e também um dos mais versáteis [47].

Um *splitter* de propileno é de uma forma mais simplificada uma coluna de destilação que efetua a separação entre propileno e propano, com o objetivo de obter uma corrente com mais pureza em propileno devido ao facto de este ter maior valor comercial.

Os processos de separação do propileno com vista a obter uma corrente com mais pureza de propileno concentram-se em dois diferentes tipos que se encontram demonstrados seguidamente.

2.4.1 High Pressure System

Existem duas maneiras distintas de efetuar o design das colunas, uma delas denomina-se *por High Pressure System* como está representado na figura 2.13. Este sistema caracteriza-se por conter um condensador com o objetivo de arrefecer o vapor de topo, posteriormente é necessário um compressor para desta forma aumentar a pressão da corrente de propileno e conseguir que a mesmo condense a temperaturas próximas dos 40°C [48].

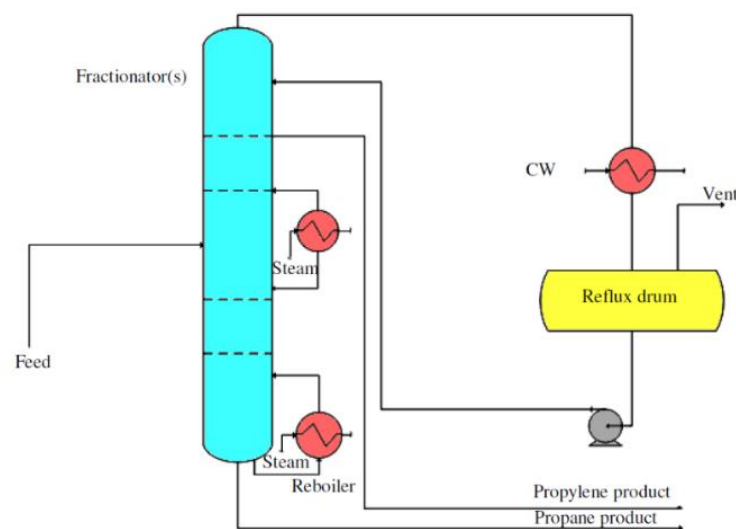


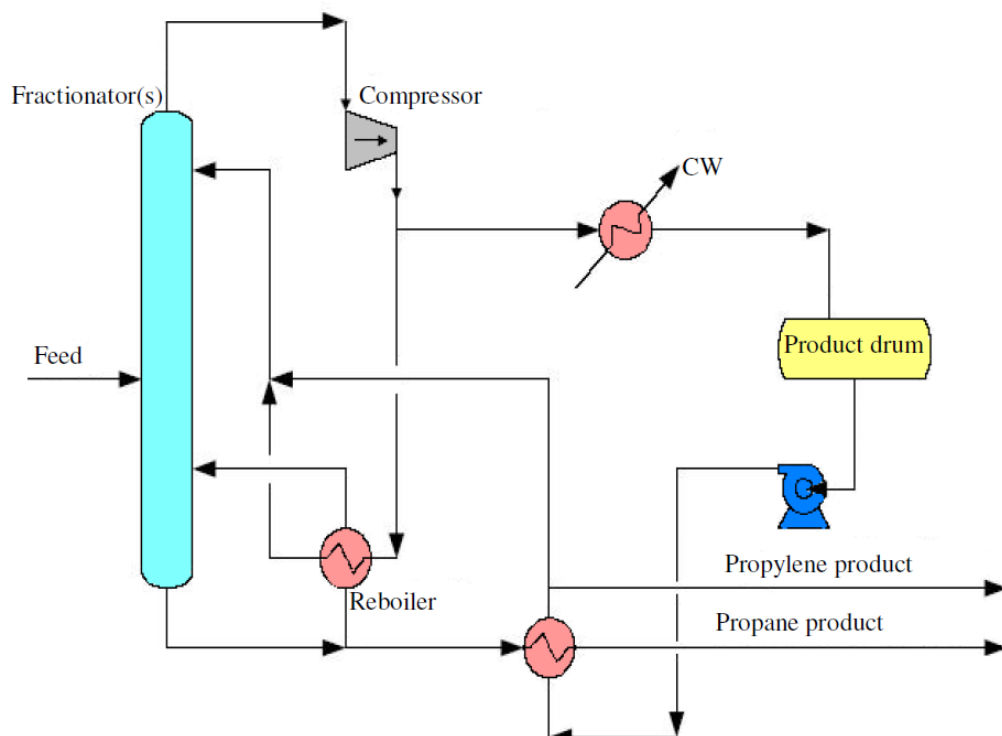
Figura 2.13 - High Pressure System [72].

Apesar do sistema ser igual à diferentes condições operatórias e de design implementadas. Segundo S. M. Mauhar et al [60] uma coluna com este tipo de sistema pode ser constituída com 241 pratos, a ser alimentada no prato 156 e retirando propileno no prato 24. Segundo o mesmo pode ter amplitudes de temperaturas entre 35.7 °C e 49.2 °C e de pressões entre 1.595 e 1.756 MPa.

Segundo A. M. Umo et al [59] a coluna simulada contém 150 pratos, a ser alimentada no prato 52 e uma razão de refluxo de 10.2 com unidades desconhecidas. Segundo o mesmo pode ter amplitudes de temperaturas entre 41.75°C e 54.24 °C e de pressões entre 17.22 e 19.25 bar.

2.4.2 Heat Pumped System

Nos processos de destilação as volatilidades relativas são bastante importantes para a eficiência do processo e podem ser favorecidas pela diminuição da pressão da coluna. Esta diminuição de pressão resulta num menor número de pratos teóricos pois não serão necessários tantos pratos para efetuar uma separação igualmente eficiente e numa menor corrente de refluxo. Esta diminuição de custos é posteriormente compensada pelo custo energético do compressor [48].



O nome de *Heat Pumped* é devido à configuração que se encontra representada na figura 2.14, onde se bombeia ou move-se calor de um sítio para outro utilizando na sua estrutura um compressor e um revaporizador o que faz com que se use uma pequena quantidade de energia em relação à energia térmica recuperada [72].

22

2.5 Hydrocracker

Hydrocracking é um processo de hidrogenação catalítico, que converte moléculas com maior peso molecular em moléculas mais leves que futuramente têm maior valor comercial. A conversão catalítica ocorre em reatores de leito fixo a pressões e temperaturas elevadas. O catalisador utilizado é um catalisador bifuncional sendo composto por duas zonas distintas uma zona metálica e outra ácida [50].

O gasóleo de vácuo é a principal carga utilizada nos HC, no entanto, podem utilizar-se uma enorme variedade de cargas que originam diferentes produtos como se encontra na tabela 2.1 [50].

Tabela 2.1 - Alimentação de uma unidade de hydrocracking e respetivos produtos.

Alimentação	Produtos
Querosene	Nafta
<i>Straight Run Diesel</i>	Nafta e/ou <i>jet fuel</i>
Gasóleo Atmosférico	Nafta, <i>jet fuel</i> e/ou diesel
Gasóleo de Vácuo	Nafta, <i>jet fuel</i>, diesel, óleo lubrificante
FCC LCO	Nafta
FCC HCO	Nafta e/ou destilados
Coker LCO	Nafta e/ou destilados
Coker HCO	Nafta e/ou destilados
Óleo desasfaltado	Olefinas

O processo de *hydrocracking* pode ter diferentes configurações tais como conter um estágio de reação com ou sem reciclo ou dois estágios de reação com reciclo [51].

No caso do HC da Refinaria de Sines o processo ocorre em dois estágios com reciclo assumindo uma conversão de 99% onde se destacam o diesel (gasóleo) e o *jet* dos produtos produzidos. Esta unidade produz ainda 23% de componentes de nafta, 3% LPG e 1% de UCO que é utilizado na carga ao FCC [52].

A unidade inclui seções de fracionamento, de recuperação de gases, de tratamento e fracionamento de LPG e de tratamento de fuel-gás com amina e respetiva regeneração [52].

2.5.1.1 Catalisador de HC

O catalisador tem como função acelerar a reação química pois fornece uma superfície que torna mais favorável a ocorrência de reações. Como referido anteriormente o catalisador é bifuncional, ou seja, contém dois centros ativos, um metálico e outro ácido. Os seus centros metálicos promovem a hidrogenação que por sua vez garante a remoção de impurezas tais como enxofre, nitrogénio e metais. Da mesma forma estes centros metálicos evitam a ocorrência de reações de hidrogenólise [50].

Por sua vez a parcela ácida promove a isomerização e o craqueamento que quebra ligações originando desta forma produtos insaturados que posteriormente são hidrogenados e transformam-se em produtos estáveis. Os centros de hidrogenação devem estar situados na proximidade dos centros de craqueamento, isto porque para ser eficiente a transferência molecular entre eles deve ser rápida de modo a evitar reações secundárias indesejáveis [50].

A razão entre a função de craqueamento e de hidrogenação pode ser ajustada para otimizar a atividade e seletividade, ou seja, se se desejar uma produção em destilados médios significa que a razão metal/ácido é elevada. Contrariamente quando a razão é menor produz-se mais gasolina. Para manipular e ajustar é necessário ter em conta o catalisador utilizado e a respetiva eficácia nos processos de craqueamento e hidrogenação. Na tabela 2.2 encontram-se diferentes catalisadores bifuncionais e o seu potencial par cada reação [50].

Tabela 2.2 – Catalisadores bifuncionais e o respectivo potencial para cada reação

Hidrogenação	Co/Mi +	Ni/Mo ++	Ni/W +++	Pt(Pd) ++++
Craqueamento	Al ₂ O ₃ +	Al ₂ O ₃ -Hal ++	SiO ₂ - Al ₂ O ₃ +++	Zeólito ++++

A imagem 1.3.1 demonstra um zeólito do tipo Y, que assume uma estrutura faujasite onde basicamente tem aberturas largas (*super cage*) que controlam o acesso dos reagentes e estrutura porosa tridimensional que permite a difusão dos reagentes e produtos sem interferência [53].

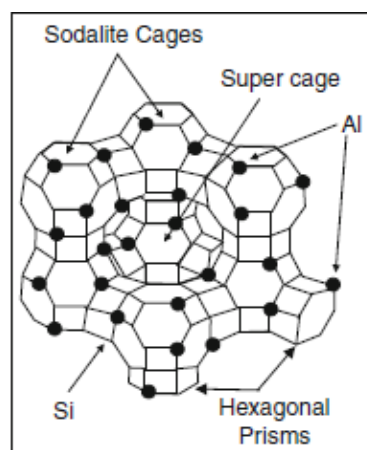


Figura 2.15-Catalisador do tipo Zeólito Y

Finalmente é importante ter em conta que a atividade do catalisador é favorecida pelo:

- Aumento da força ácida, concentração e distribuição de centros ácidos;
- Aumento da dispersão de centros metálicos;
- Pressão parcial elevada de H₂;
- Caudal baixo de carga.

Ao longo do tempo o catalisador sofre *fouling*, este é um processo gradual no qual ocorre a deposição de compostos de carbono(coque). Este processo origina a descativação do catalisador, no entanto, pode se reverter este efeito e o catalisador voltar a estar ativo através da combustão do coque com ar. Durante o processo o coque é convertido em CO₂ e H₂O.

Identicamente ocorre a deposição de metais (Pb,Fe,As,P,Na,Ca) e compostos organometálicos provenientes da carga que impedem o acesso aos centros ativos. Contrariamente à situação anterior é inexequível reverter esta deposição e a mesma pode ocorrer em qualquer zona do catalisador.

2.5.1.2 Secção de Reação

Na figura 2.16 encontra-se uma representação esquemática da unidade do HC onde se verifica a operação a decorrer em dois estágios. Este sistema tem um circuito de altas pressões e inclusive as reações de *hydrocracking* e hidrotratamento ocorrem a elevadas temperaturas e pressões. Esta unidade, com 99% de conversão tem uma capacidade de 43000 barris/dia [54].

Na primeira etapa a conversão de VGO é aproximadamente 50% vol e o efluente desta etapa composto por destilados médios é posteriormente separado e encaminhado para uma coluna de fracionamento. Os resíduos da destilação que correspondem ao que não foi convertido no 1º estágio, UCO, são convertidos na 2ª etapa, apresentando uma conversão de cerca de 60% [3].

Os gases e naftas são encaminhados para a secção de recuperação *de light ends* onde se produz *fuel gas*, LPG, nafta leve e nafta pesada estabilizadas. O LPG é enviado posteriormente para a secção de tratamento de LPG onde se separam duas correntes distintas de propano e butano.

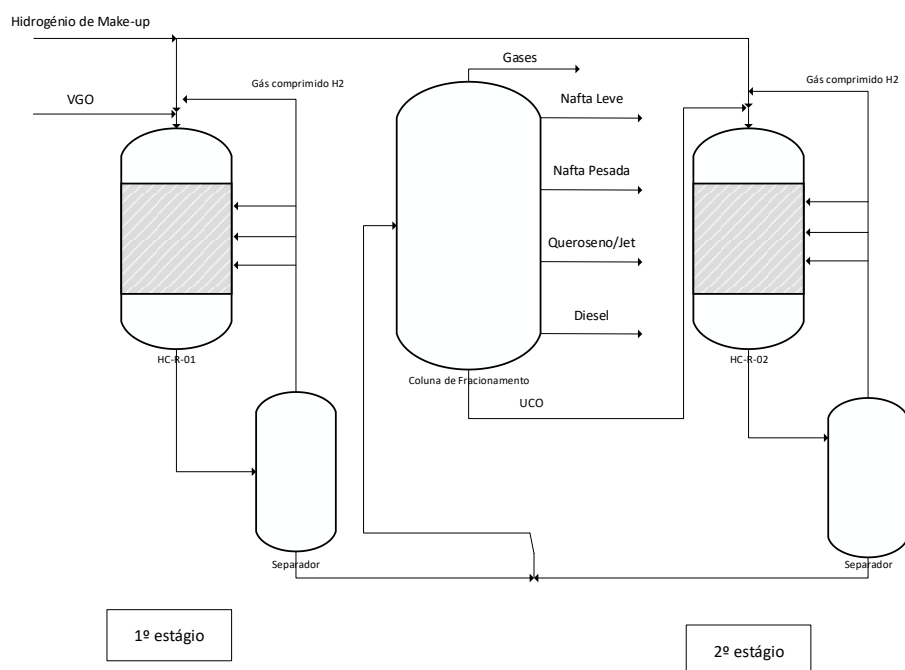


Figura 2.16 - Representação esquemática da unidade do HC [50].

Apesar de não estar discriminado na figura existe um reator de hidrotratamento no 1º estágio que ajuda na remoção de enxofre e azoto, o que garante que o catalisador no 2º estágio opere na ausência de NH₃ e H₂S o que evita a ocorrência de envenenamento do catalisador e por conseguinte uma desativação do catalisador mais tardia.

O catalisador no 1º estágio tem um rácio alto de hidrogenação/acidificação o que permite remover o enxofre e o nitrogénio. No segundo estágio o catalisador já tem um rácio menor onde a produção de nafta é maximizada.

O H₂ recirculado é separado em separadores de alta pressão e reciclado para os reatores. As reações ocorrem sempre na presença de H₂, e a elevada pressão parcial do mesmo além de promover as reações, pois favorece o contacto nos reatores, ainda impede a formação de coque no catalisador. Para além destes efeitos o H₂ ainda mantém um baixo teor de azoto nos produtos garantindo desta forma as especificações requeridas [50].

As reações de *hydrocracking* são extremamente exotérmicas, por isso mesmo, utiliza-se H₂ entre cada leito que é injetado através de *quench* com intenção de controlar a temperatura das unidades. Em relação à pressão é essencial que se mantenha, pois, uma diferença de pressão promove reações de coqueificação que consequentemente resultam numa desativação do catalisador.

2.5.1.3 Reações Químicas do Processo

Pré-Tratamento

Durante a unidade de HC ocorrem reações de tratamento que consistem em remover o enxofre, azoto e metais tais como desnitrificação, dessulfuração e desmetalização. A carga de uma unidade destas contém normalmente os componentes que estão referidos anteriormente, no entanto, por vezes a carga pode conter outros compostos e por isso mesmo ser necessário efetuar-se a saturação de olefinas ou

aromáticos, a remoção de O₂ e de halogenetos. Estas reações são exotérmicas e ocorrem sempre na presença de H₂.

Craqueamento

As reações de *hydrocracking* assumem um mecanismo bifuncional tal como a estrutura do catalisador que está referido no capítulo acima. As reações de craqueamento requerem calor enquanto que as reações de hidrogenação são exotérmicas, assim sendo, quanto mais reações de hidrogenação ocorrerem maior consumo de H₂ que se traduz num aumento de temperatura.

Normalmente as reações de *hydrocracking* iniciam com a formação de olefina ou ciclo de olefina promovida pela zona metálica do catalisador, posteriormente com a zona ácida forma-se um ião carbénio. Seguidamente este ião sofre uma isomerização e um craqueamento formando olefinas menores, estas são as primeiras reações que ocorrem num *hydrocracker* [51].

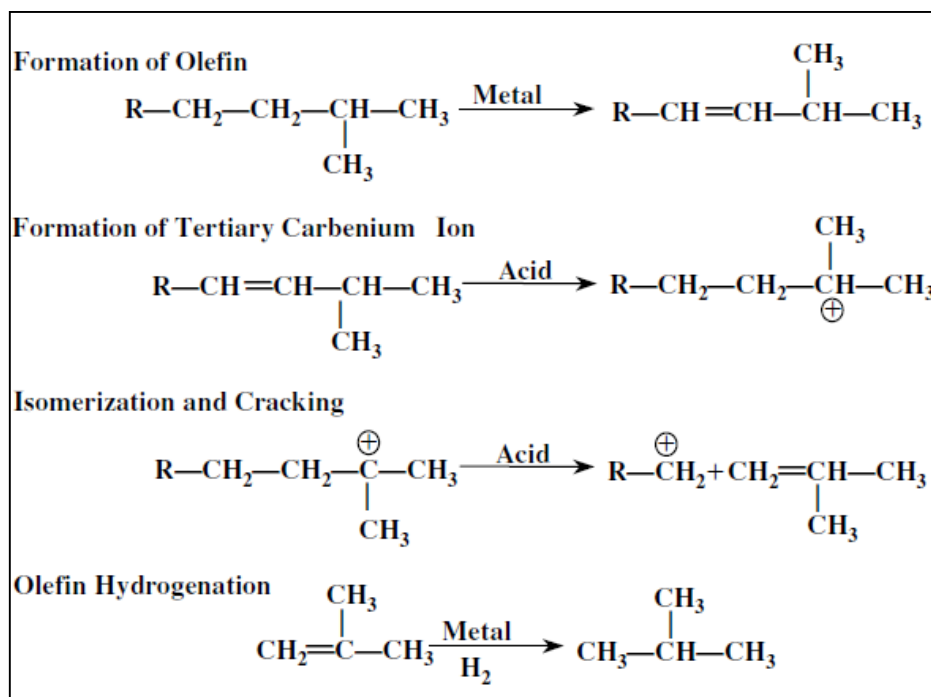


Figura 2.17 – Reações que ocorrem inicialmente [51].

Adicionalmente ocorrem reações de saturação de aromáticos e o designado *hydrocracking*, onde ocorre craqueamento na presença de H₂ como se encontra um exemplo na figura 2.17 Na tabela 2.3 apresentam-se as termodinâmicas das reações mais importantes [51].

Tabela 2.3- Características termodinâmicas das reações mais importantes.

Reação	Equilíbrio	Calor de Reação
Formação de Olefinas	Não é favorável, mas não é limitante	Endotérmica
Saturação de Aromáticos	A elevadas temperaturas não é favorável	Exotérmica
Craqueamento	Favorável	Endotérmica
Hidrodesulfuração	Favorável	Exotérmica
Hidrodessnitrificação	Favorável	Exotérmica

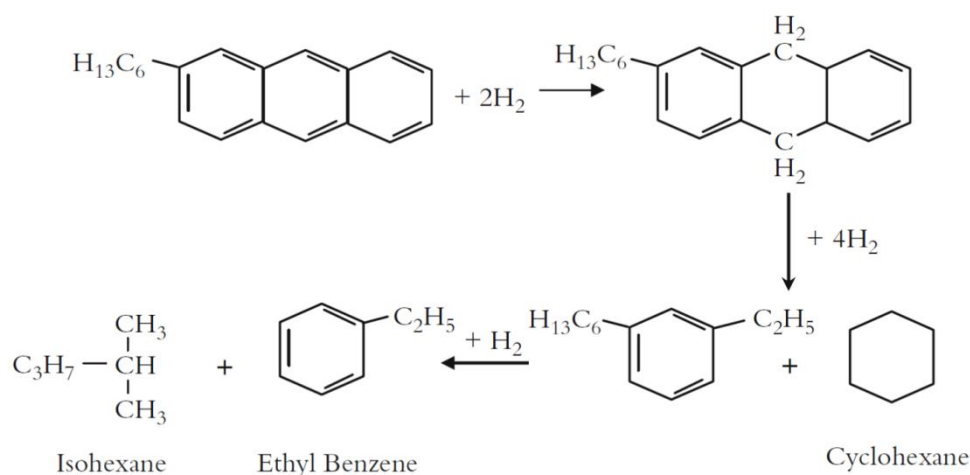


Figura 2.18 - Hydrocracking de um aromático polinuclear [73].

2.6 Fluid Catalytic Cracking

A unidade de FCC são unidades onde ocorrem processos que transformam frações pesadas de baixo valor tais como VGO em produtos de grande valor tais como gasolina, olefinas (C_3 e C_4) e LPG.

Esta unidade depende da circulação de um catalisador zeólito que se comporta como um fluido quando em suspensão numa corrente de vapor ou ar e neste caso circula no vapor da alimentação na forma de pequeníssimas partículas esféricas. O seu destino é o reator *riser* onde se processam as reações de craqueamento, porém é enviado de volta para o regenerador onde o coque é queimado e o catalisador regenerado. A combustão do coque gera calor requerido para a reação que ocorre no reator que é endotérmica [55] [50].

Apesar da maior parte da carga ser VGO também faz parte da alimentação a esta unidade correntes provenientes da unidade de *visbreaker* tais como gases e naftas. Em determinadas ocasiões o resíduo atmosférico também pode ser misturado à carga de alimentação, mas apenas até uma certa quantidade em relação ao volume total no caso do *Cat Cooler* não estar em funcionamento.

Um aspeto importante a ter em conta na carga é o CCR (*Conradson Carbon Residue*), que em suma é o indicativo da tendência de deposição de carbono da carga [56].

Esta deposição pode ir além da capacidade de queima do regenerador [50].

Os produtos do reator *riser* são separados do catalisador através de um processo designado *stripping* para depois serem encaminhados para uma coluna de destilação onde são separados. Os produtos produzidos pelo FCC e o respetivo rendimento dos mesmos encontra-se na tabela 2.4 [50].

Tabela 2.4-Produtos e respectivos rendimentos duma coluna de HC

Produtos	Características	Rendimento (% m)
Gas + H_2S	H_2S deve ser removido	3-5
LPG	Produtos Finais	8-20
Gasolina	Produto Principal, elevado IO	35-60
Gasóleo Leve	Rico em aromáticos, elevada quantidade de enxofre	12-20
Gasóleo Pesado + <i>Slurry</i>	Muito Rico em aromáticos	10-15
Coque	Consumido no regenerador	3-5

Estas unidades contêm três secções, que contêm as respetivas explicações abaixo:

- Secção de Reação ou Conversão: considerada o coração do processo constituída pelo reator (*riser*), onde ocorrem as reações de craqueamento, e o reator de regeneração.
- Secção de Fracionamento: esta secção é composta por uma coluna de fracionamento que separa em diferentes cortes os hidrocarbonetos craqueados do reator.
- Secção de Recuperação de Gases: esta secção separa os efluentes do topo da coluna em gasolina, LPG e fuel gás. Posteriormente são encaminhados para as unidades de aminas, Merox de LPG, e dessulfuração de gasolina.

Na figura 2.19 encontra-se uma imagem que ilustra de modo simplista as secções referidas [50].

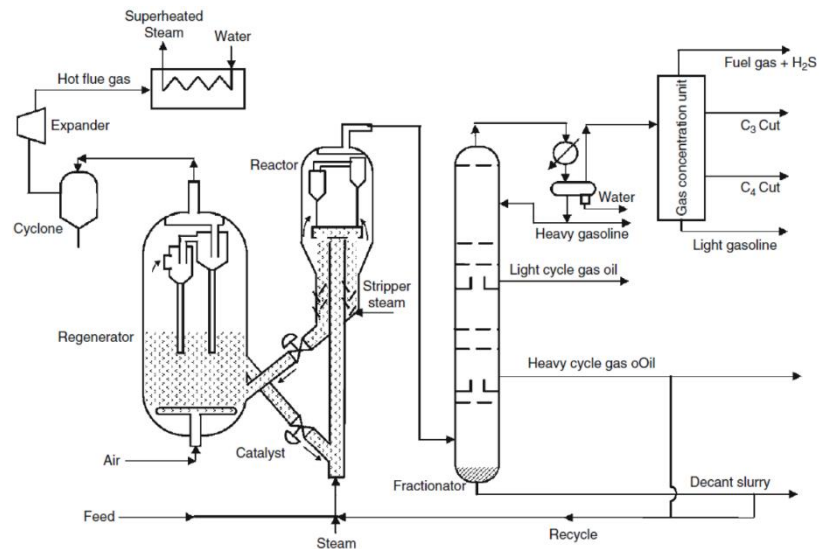


Figura 2.19 - Flowsheet do FCC.[50]

2.6.1.1 Secção de Reação ou Conversão

A configuração da secção pode ser de dois tipos como se encontra na figura 2.20, a configuração em vigor é a que se designa "*Side-by-Side type*" [50].

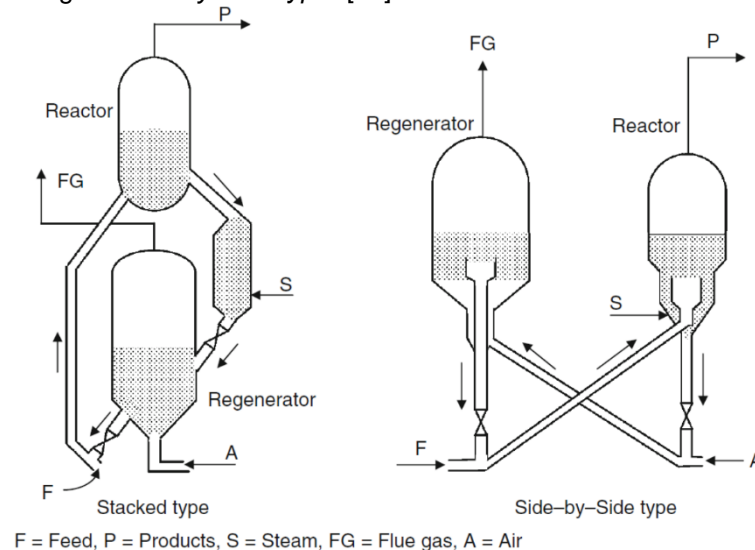


Figura 2.20 - Duas diferentes configurações do FCC [50].

A carga é introduzida na base do reator a cerca de 20% da altura do *riser* usando injetores de vapor de modo a ficar pulverizada sob a forma de gotas como se demonstra na figura 2.21 [55].

Na base do reator mistura-se com o catalisador quente sendo elevados juntos até à zona de separação do reator, durante este caminho ocorrem as reações de craqueamento [57].

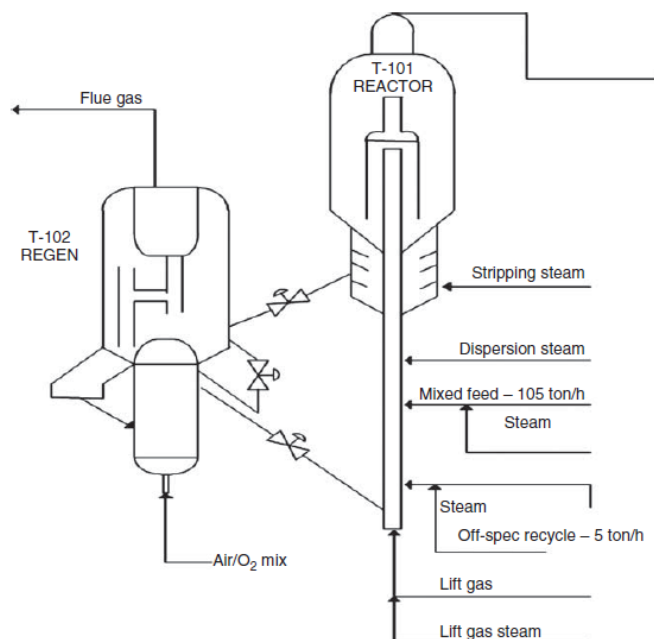


Figura 2.21 - Esquema geral duma típica unidade de FCC [57].

No topo do reator encontram-se um sistema de ciclones cuja função é separar o catalisador dos hidrocarbonetos evaporados que são posteriormente encaminhados para a coluna de fracionamento.

Este sistema permite uma separação rápida com a grande vantagem de reduzir as sobrecoqueificações e as reações térmicas que poderão degradar a qualidade dos produtos.

O catalisador vai para a zona de *stripping* onde os hidrocarbonetos que porventura ainda se encontrem misturados são removidos com vapor através de injeção de vapor. O *stripping* pode ser de enchimento, tabuleiros ou pratos, recentemente o *stripping* alterou-se de enchimento para pratos esta mudança deveu-se ao facto de o enchimento de pratos favorecer na separação. O stripper contém uma válvula que controla o nível de catalisador que é introduzido no regenerador.

O processo de regeneração decorre quando o catalisador exausto entra em contacto com ar e catalisador regenerado (para manter a temperatura mínima de combustão apropriada e o coque começa a queimar reativando o catalisador).

O coque é maioritariamente oxidado produzindo CO e CO₂ como produtos primários e SO_x e NO_x como produtos secundários [50].

Na parte superior do regenerador o catalisador regenerado e os gases de combustão são separados através de um sistema de ciclones, na figura 2.19 encontram-se representados os ciclones de ambos os reatores.

Estes gases de combustão tem uma quantidade apreciável de energia e por isso mesmo são aproveitados passando numa turbina que por expansão fornece energia.

O catalisador regenerado efetua recirculação da zona superior para a inferior no reator com o objetivo de fornecer calor adicional à combustão, este fluxo controla também a temperatura e a densidade na zona do combustor [50].

2.6.1.2 Cat Cooler

Hoje em dia, os crudes apresentam-se cada vez mais pesados e contaminados, devido também à quantidade de betume que contêm. Tipicamente estes crudes tem níveis altos de *Conradson Carbon*, que por sua vez, têm um impacto considerável no FCC. Quando se processa cargas com altos níveis de *Conradson Carbon*, a conversão de coque é substituída por *contaminant coke* a uma conversão ligeiramente mais baixa [58].

Quando as condições de operação estão constantes, se o delta do coque (diferença do coque entre o catalisador regenerado e o catalisador gasto) alterar também a temperatura do regenerador vai alterar. No caso do delta coque aumentar a temperatura do regenerador também aumentará, o que provoca uma menor circulação do catalisador de modo a manter a temperatura do reator constante, pois no caso de se recircular originar-se-ia produtos indesejáveis devido às elevadas temperaturas [58].

O delta coque basicamente tem algum impacto na conversão e seletividade devido à sua influência na temperatura do reator e no rácio de catalisadora carga no reator [58].

O *Cat Cooler* é então utilizado como uma estrutura de remoção de calor de controlo variável que fornece um grau extra de liberdade no balanço de calor para compensar rápida e suavemente as alterações de alimentação e/ou operação da unidade [58].

Como foi dito no início da descrição da unidade a quantidade de resíduo atmosférico sem *Cat Cooler* teria que ser limitada, no entanto, com a utilização do mesmo já se pode introduzir cargas com mais RA (contêm mais CCR) [58].

2.6.1.3 Secção de Fracionamento

Nesta coluna de fracionamento os efluentes do reator são separados dando origem a produtos de topo tais como gasolina e gases que são posteriormente condensados e parte desta quantidade vai fazer refluxo ao topo da coluna.

Correntes laterais tais como gasóleos (LCO e HCO), após remoção dos leves são enviados para reprocessamento ou armazenagem.

Ainda em relação a produtos retirados mais acima na coluna tais como a nafta de *cracking* e os hidrocarbonetos mais leves, estes saem juntos pelo topo e são futuramente separados na unidade de recuperação de gases [55].

Por fim o produto de fundo da coluna vai ser aproveitado a nível energético, permutando calor com a carga e utilizado na geração de vapor.

Presentemente uma das correntes finais que sai do FCC contém propano e propileno com composições de 25% e 75% respetivamente.

O valor das correntes como produto final no mercado é atribuída consoante a pureza de propileno na mesma de modo que existem diferentes categorias[59]:

- *Polymer* -mínimo de 99.5 % de pureza;
- *Chemical* – 90-95% de pureza;
- *Refinery*- 75% de pureza.

Esta corrente pertence a uma categoria designada *propylene refinery grade* em que, apesar da presença de propano o mesmo não é valorizado no produto [60].

Para estes casos, já foram desenvolvidas e patenteadas diferentes técnicas para efetuar a separação de propileno e propano. Na figura 2.21 encontra-se um esquema simplificado do processo da UOP onde se verifica a presença da unidade designada por “Propylene Recovery” [50].

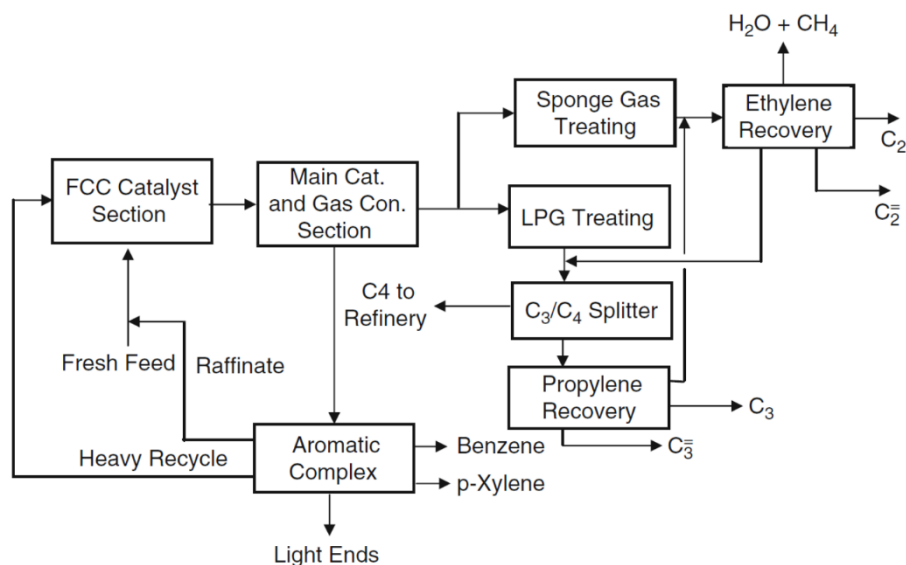


Figura 2.22 – Esquema do FCC proposto pela UOP [50].

2.6.1.4 Reações Químicas do Processo

A alimentação que entra na unidade do FCC é uma mistura bastante complexa composta por longas cadeias de parafinas, anéis e múltiplos-anéis de Naftenos (Cicloalcanos) e extensos compostos aromáticos.

As reações mais significantes que ocorrem nesta unidade são: craqueamento, isomerização e transferência de hidrogénio.

De um modo resumido qualquer um dos componentes da carga sofre as referidas reações, pode-se resumir as reações de cada um como se encontra na figura 2.24 [61].

Craqueamento	Isomerização	Tranferência de Hidrogénio
Parafinas → Parafinas + Olefinas	Olefinas → Olefinas + Parafinas (ramificadas)	Olefinas → Parafinas
Olefinas → Olefinas LPG	Naftenos → Naftenos estruturados	Naftenos → Aromáticos
Nafteno → Olefinas		Aromáticos → Poliaromáticos → Coque
Alquil-Aromáticos → Aromático + Olefina		

Figura 2.24 - Reações que ocorrem durante o processo adaptado de [16].

As reações de craqueamento catalítico formam os primeiros compostos que posteriormente evoluem para LPG, *light gas*, cadeias de parafinas do gasóleo e aromáticos presentes em todos os produtos. Para além das reações catalisadas ocorrem também reações térmicas que produzem bastante quantidade de metano e etano e resulta numa grande produção de coque. Adicionalmente as reações térmicas não são o cenário economicamente mais operacional [57].

Os processos de isomerização aumentam particularmente o índice de octanas na gasolina e converte butanos em componentes valiosos de isobutenos [57].

As transferências de hidrogénio melhoram o rendimento em gasolina e estabilidade (diminuindo olefinas). No entanto diminuem a octanagem total do produto através da produção de parafinas e aromáticos com menor índice de octano por isso mesmo estas reações têm que ser limitadas. As olefinas consumidas neste processo não são recuperáveis nas unidades de recuperação [57].

Ainda ocorrem outras reações tais como a desidrogenação, desalquilação e por fim condensação do anel aromático.

A desidrogenação é uma reação resultado da presença de níquel e vanádio no catalisador pois estes promovem a desidrogenação e a desalquilação. Nestas reações são produzidas grandes quantidades de H_2 e parafinas com octanagem menor.

Por fim durante o processo de coqueificação segue-se a polimerização de olefinas e condensação do anel aromático [57].

2.6.1.5 Catalisador do FCC

Presentemente o catalisador utilizado no processo contém uma estrutura de rede que atua como peneiro molecular que se designam-se zeólitos. Estes catalisadores assumem alta atividade, estabilidade e propriedades catalíticas superiores. A atividade catalítica ocorre nas designadas zonas ácidas onde ocorre craqueamento transformando moléculas de gasóleo em gasolina e produtos mais leves sem formação significativa de coque [50].

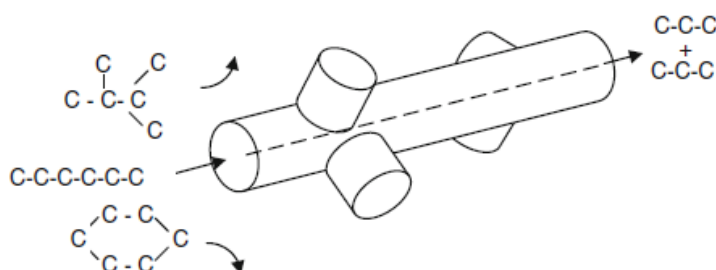


Figura 2.25 - Representação Esquemática do cacking selectivo efectuado pelo zéolito [50].

Estes catalisadores especificamente produzem mais gasolina, menos gás e menos coque que os outros tipos de catalisadores habitualmente usados.

O corpo das partículas de catalisador é constituído por poros onde se localizam as zonas ativas e onde ocorrem as reações de *cracking*.

Neste caso específico os catalisadores assumem um movimento que é baseado em técnicas que foram desenvolvidas para permitir o manuseamento de pós como se fossem fluidos. Esta peculiaridade permite que a camada com o catalisador fluidificado atravessasse um tubo tal como um líquido, o que por sua vez, faz com que haja transferência de catalisador entre os diversos equipamentos de FCC [57].

3 Estratégias e Metodologias

3.1 Validação e Calibração do Modelo de HC

Os modelos de simulação utilizados na presente dissertação foram desenvolvidos usando o simulador Petro-SIM™ versão 6.2.

Os modelos utilizados tinham pré-selecionado o modelo termodinâmico *Peng-Robinson*, tanto a unidade de HC como a unidade de FCC, no entanto como se encontra na seção 2.2.2 foi efetuado um pequeno estudo e verificação da equação de estado escolhida.

Inicialmente já havia um modelo do *Hydrocracker* da Refinaria de Sines e por isso com vista a poder utilizar de forma correta o mesmo foi efetuada a verificação da validade do modelo tendo em conta o cenário atual.

O modelo já efetuado tinha o seguinte aspeto:

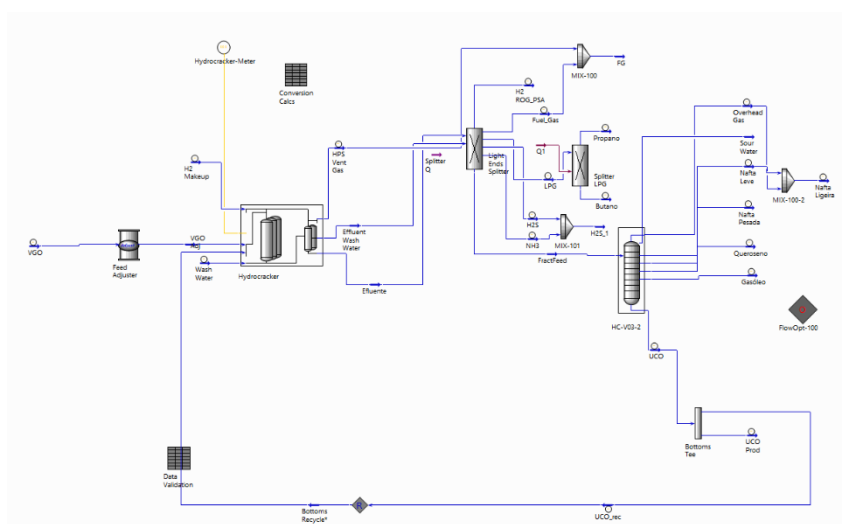


Figura 3.1 - Esquema do Hydrocracker

No modelo já construído do *Hydrocracker* seleccionou-se a unidade de HC e construiu-se um ficheiro Excel que continha toda a informação que é utilizada para o modelo ser simulado, ou seja, de certa forma constituía um menu de *inputs*.

A figura 3.3 demonstra as diferentes seções do Excel, para a primeira abordagem inseriu-se os dados no separador de *Predict Input* como se encontra na figura. Os futuros resultados irão aparecer no separador designado *Predict Output*.

Figura 3.2 - Esquema dos passos onde se retira o Excel

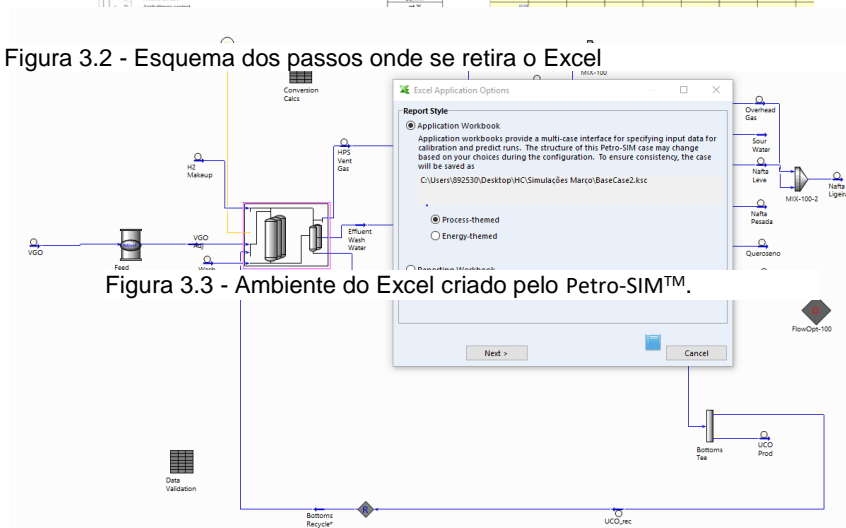


Figura 3.3 - Ambiente do Excel criado pelo Petro-SIM™.

Nesta etapa fase foi necessário recolher dados, que dataram de finais de setembro e meados de outubro, mais precisamente 4 dias em 4 semanas diferentes. Esta escolha de datas relaciona-se com dois factos, o comportamento estável que o *hydrocracker* assumia neste período e o facto de seguidamente ter ocorrido a paragem sectorial o que poderia influenciar alguns valores.

Os dados recolhidos numa primeira etapa foram os seguintes:

- Análises semanais designadas por *test-runs*(quintas-feiras);

As análises semanais, designadas habitualmente *test run* são análises efetuadas às amostras de cada unidade que correspondem a um dia de semana específico. Neste sentido são recolhidas amostras de todas as correntes principais (matérias primas, produtos, correntes intermédias) para de facto existir uma visão criteriosa do desempenho atual da unidade. As análises às amostras conseguem traçar assim o perfil da carga.

Estas análises são efetuadas pelo laboratório da Refinaria de Sines e encontram-se disponíveis na plataforma LIMS (*Laboratory Information Management System*). No caso do HC todas as quintas-feiras faz-se uma amostra detalhada da carga e dos produtos da unidade.

No caso de se desejar saber de outro dia senão o dia específico da unidade, são recolhidas amostras de controlo para análise de estabilidade de operação e identificação de eventuais desvios ao normal funcionamento da unidade.

- Características das correntes do processo:
- Pequeno número de condições operatórias do *Hydrocracker*,

Os dados recolhidos das análises semanais são: enxofre, azoto, asfaltenos (C7 insolúveis), cinzas, massa volúmica e a curva de destilação. As diferentes análises semanais são do gasóleo de vácuo que entra na unidade

Relativamente às correntes de alimentação retiraram-se dados que se consideraram mais pertinentes e mais gerais para tentar simular o processo tais como as temperaturas, pressões e caudais do gasóleo de vácuo e do H₂ de make-up.

Em relação ao principal reator as condições operatórias recolhidas foram a pressão do primeiro enchimento do reator e o hidrogénio que entra neste estágio do reator.

Relativamente ao primeiro reator utilizou-se dados tais como a temperatura e caudais dos *quench* dos três primeiros enchimentos e também o caudal de hidrogénio na carga ao 1º reator

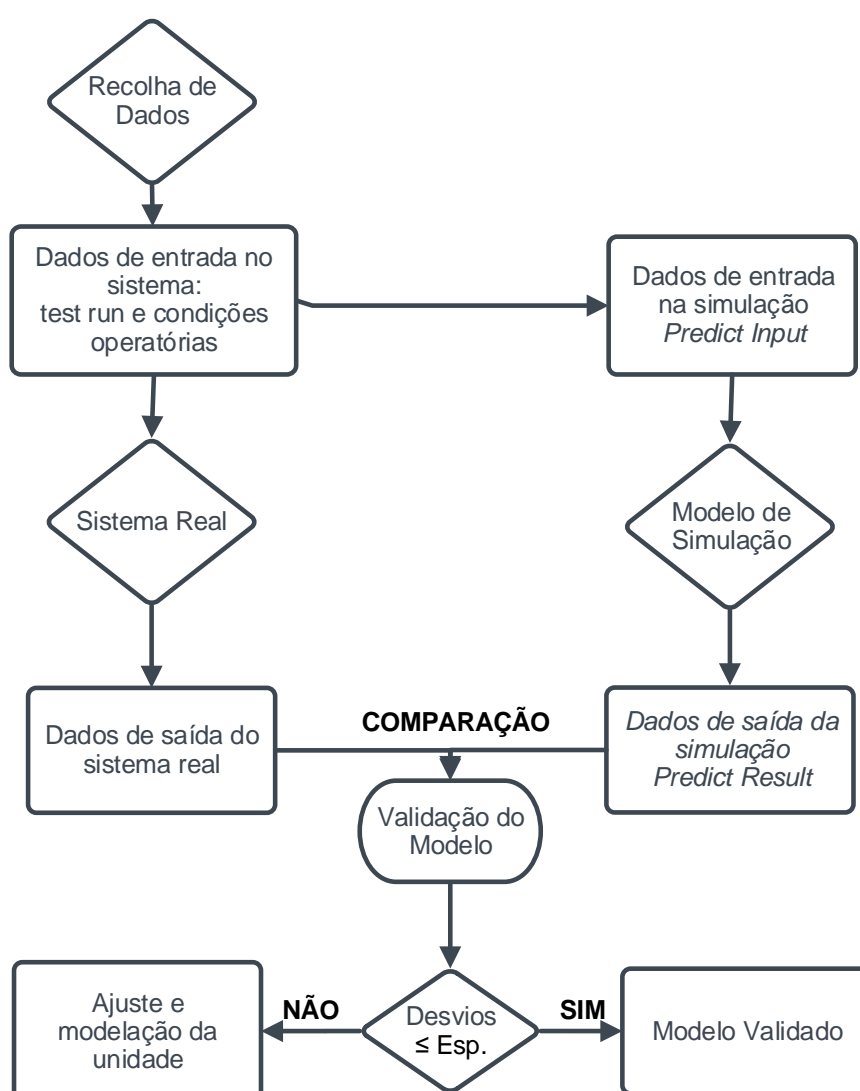


Figura 3.4-Metodologia: Etapa Validação

3.1.1 Validação do HC

A figura 3.4 ilustra a primeira abordagem efetuada nesta fase, as unidades que se encontram assinaladas a verde indicam as variáveis que se podem alterar, os valores assinalados a laranja foram os preenchidos.

Esta seção utiliza nos espaços deixados em branco os valores já validados e calibrados da simulação pré-definida.

Com os dados no *Predict Input* selecionou-se o botão do que se encontra no canto superior esquerdo, *Run*, para se conseguir simular.

Figura 3.5 - Excel já preenchido para a 1ª simulação.

Após se conseguir simular para as diferentes datas, recolheu-se todos os resultados da simulação que se encontravam no *Predict Result*. Para o processo de validação é necessário comparar os rendimentos reais com os simulados para verificar se o modelo efetivamente traduzia a realidade.

Com os dados reunidos efetuou-se uma análise aos valores e até aos respetivos desvios de modo a conseguir obter uma maior sensibilidade.

As curvas de destilação para cada composto são pertinentes, uma vez que têm também uma relação direta com os rendimentos desta forma foi construída uma análise às curvas de destilação e posteriormente aos rendimentos. Os gráficos e a interpretação dos mesmos encontram-se nos resultados na secção 4.2.

3.1.2 Aproximação à realidade

Primeiramente foi necessário retirar mais dados relativos ao *hydrocracker* que desta forma o caracterizassem melhor ajudando a simulação a aproximar-se mais da realidade. Posteriormente passou-se para o modelo em ambiente de simulação por uma questão prática e efetivamente para tornar mais simples a deteção de erros que fossem surgindo.

Adicionalmente selecionou-se apenas uma data, arbitrariamente escolheu-se 25/set, pois já não se estava a trabalhar no *workbook* o que impossibilitava a simulação de diferentes casos ao mesmo tempo.

Recolheu-se dados tais como a temperatura e a pressão de cada leito de ambos os reatores e inclusive a quantidade de catalisador.

Também as pressões dos separadores de alta pressão tanto o frio como o quente foram incluídas na simulação, pois visto que fazem parte da simulação e tem efeito nos produtos finais faz todo o sentido tentar colocar valores reais.

Estes dados foram todos incluídos no documento de Excel que se encontra interligado com o Petro-SIM™.

A primeira secção a ser verificada foi a do reator, em baixo encontra-se uma imagem simples da estrutura do mesmo.

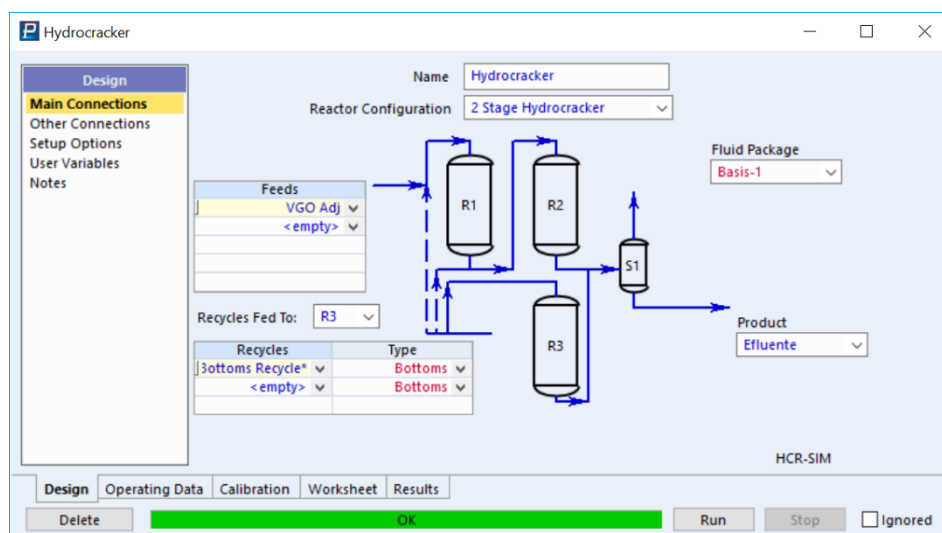


Figura 3.6 - Ambiente do reator

No início como se demonstra na figura 3.6 encontra-se a secção do *Design* que basicamente tem como função especificar o design da configuração do *hydrocracker* estabelecendo os parâmetros do mesmo e as conexões das correntes. Posteriormente contém subsecções do mesmo design como se verifica do lado superior esquerdo na figura.

A secção seguinte designa-se *Operating Data* que basicamente é um guia que exhibe os dados do reator operacional e os parâmetros de objetivo.

Parameter	Target	Value
R-1 Bed Inlet Temperature	<input checked="" type="checkbox"/>	367.1 C
R-2 Bed Inlet Temperature	<input type="checkbox"/>	397.5 C
R-3 Bed Inlet Temperature	<input type="checkbox"/>	359.9 C
Overall HCR Conversion	<input checked="" type="checkbox"/>	95.0000 vol %
R-1 Effluent Nitrogen	<input type="checkbox"/>	0.0134 wt %
R-1 Apparent Conversion	<input type="checkbox"/>	19.8941 vol %
R-2 Apparent Conversion	<input checked="" type="checkbox"/>	38.9638 vol %

Bed	Inlet T	Delta T from R1Bed1
Bed 1	367.1 C	<empty>
Bed 2	383.5 C	<empty>
Bed 3	396.8 C	<empty>

Figura 3.7 - Convergence Target, Operating Data -Hydrocracker

Uma das coisas notórias nesta secção foi a conversão total ser de 95%, não se alterou nada nesta fase, mas apontou-se este valor. Relativamente à conversão aparente do 2º reator não se teve a mesma atenção visto que não é tão relevante e influenciador como a outra conversão.

Relativamente à secção seguinte é possível definir duas coisas distintas, mas o modelo definia antecipadamente o caudal de *Vent Gas* como está na figura 3.8.

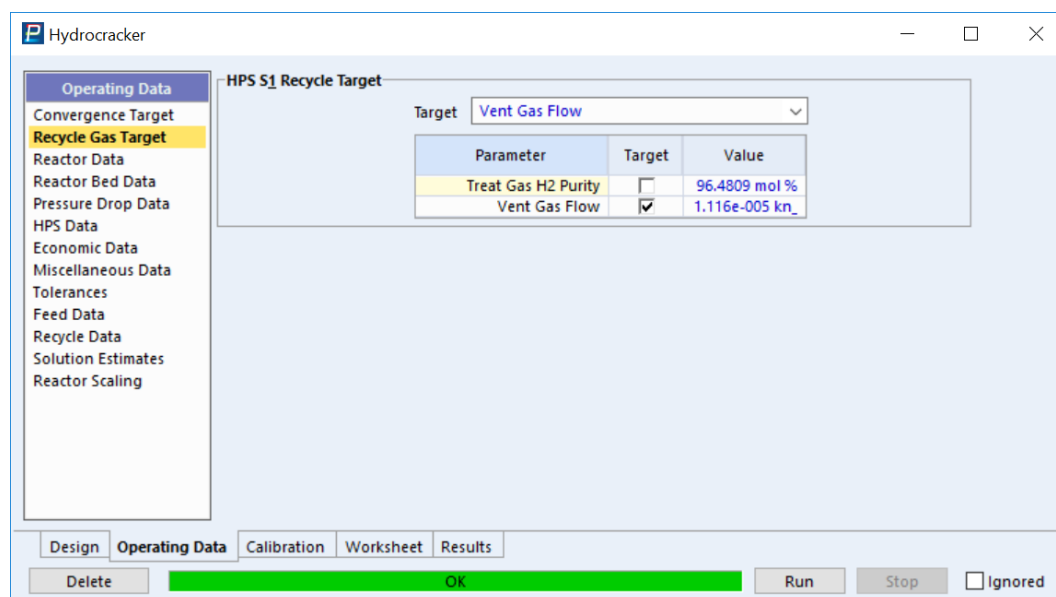


Figura 3.8 - Recycle Gas Target, Operating Data Hydrocracker

A seguinte sub-secção *Reator Data* continha uma lista de diversas informações acerca dos três reatores, verificou-se todos os valores especialmente os que estavam assinalados como requeridos.

The screenshot shows the 'Hydrocracker' software window with the 'Reactor Data' section selected in the sidebar. The main window displays a table with columns for 'Reactor R1', 'Reactor R2', 'Reactor R3', and 'Required'. The table lists various parameters for three reactors. The 'Required' column has checkboxes indicating which parameters are required. At the bottom, there are tabs for 'Design', 'Operating Data' (selected), 'Calibration', 'Worksheet', and 'Results'. Below the tabs are buttons for 'Delete', 'OK' (highlighted in green), 'Run', 'Stop', and an 'Ignored' checkbox.

	Reactor R1	Reactor R2	Reactor R3	Required
No. of Reactor Beds	3.000	3.000	4.000	<input checked="" type="checkbox"/>
Catalyst Density [kg/m3]	735.5	818.7	836.8	<input checked="" type="checkbox"/>
New Catalyst Age [m3/kg]	6.724	5.086	4.916	<input checked="" type="checkbox"/>
Inst. Deactivation Rate [C/(m3/kg)]	2.169	3.878	6.717	<input checked="" type="checkbox"/>
Catalyst Overall Activity	0.6171	0.3634	0.1454	<input checked="" type="checkbox"/>
Average Deactivation Rate [C/(m3/kg)]	< empty >	< empty >	< empty >	<input checked="" type="checkbox"/>
Typical EOR WABT [C]	417.7	421.7	371.8	<input checked="" type="checkbox"/>
Typical SOR WABT [C]	380.0	383.0	335.0	<input checked="" type="checkbox"/>
Const T Deact Const	< empty >			<input type="checkbox"/>
Previous Catalyst Age [m3/kg]	6.724	5.086	4.916	<input type="checkbox"/>
Previous WABT [C]	394.5	406.2	367.6	<input type="checkbox"/>
Previous H2 pp [bar_g]	152.2	146.7	143.8	<input type="checkbox"/>
Previous Feed Concarbon [wt %]	0.1000			<input type="checkbox"/>
H2 Treat Gas to Bed 1 [kn_m3/h]	289.1	0.0000	175.1	<input type="checkbox"/>
H2 Treat Gas Ratio to Bed 1 [nm3/m3]	< empty >	< empty >	< empty >	<input type="checkbox"/>
H2 Treat Gas to Bed 1 [tonne/hr]	< empty >	< empty >	< empty >	<input type="checkbox"/>
Base Treat Gas T [C]	66.01	< empty >	161.5	<input type="checkbox"/>
Treat Gas T ex Heater [C]	161.5	< empty >	< empty >	<input type="checkbox"/>
Liquid Quench T [C]	< empty >	< empty >	< empty >	<input type="checkbox"/>

At the bottom of the table, there is a 'Catalyst Activity Option' dropdown set to 'Use Input Values' and an 'Auto Track Catalyst Age' checkbox. A 'Reset Tracking' button is also present.

Figura 3.9 - Reactor Data, Operating Data Hydrocracker

Na seguinte secção foi possível verificar que o modelo estava a calcular os caudais e temperaturas do hidrogénio de *quench* o que pode induzir em erro e visto que se reuniram estes dados preencheu-se com os mesmos.

Operating Data

Convergence Target
Recycle Gas Target
Reactor Data
Reactor Bed Data
Pressure Drop Data
HPS Data
Economic Data
Miscellaneous Data
Tolerances
Feed Data
Recycle Data
Solution Estimates
Reactor Scaling

Guard Bed
Catalyst Weight [kg] <empty>

☒ Use model-calculated gas quench rate
☐ Use user-input gas quench rate

	Bed 1	Bed 2	Bed 3
Inlet T [C]	367.1	383.5	396.8
Inlet P [bar_g]	162.5	161.4	160.3
Catalyst Weight [kg]	2.326e+004	4.876e+004	5.034e+004
Inlet Liquid Quench [tonne]	<empty>	<empty>	<empty>

	Bed 1	Bed 2	Bed 3
Inlet T [C]	397.5	397.2	397.5
Inlet P [bar_g]	159.2	158.1	157.0
Catalyst Weight [kg]	4.898e+004	4.800e+004	6.479e+004
Inlet Liquid Quench [tonne]	<empty>	<empty>	<empty>

	Bed 1	Bed 2	Bed 3	Bed 4
Inlet T [C]	359.9	362.6	364.4	368.9
Inlet P [bar_g]	160.6	159.0	157.4	155.8
Catalyst Weight [kg]	3.775e+004	4.204e+004	4.224e+004	4.531e+004
Inlet Liquid Quench [tonne]	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>

Design Operating Data Calibration Worksheet Results

Delete OK Run Stop Ignored

Figura 3.10 - Reactor Bed Data, Operating Data Hydrocracker

Na figura 3.10 está assinalada uma das opções que foi então alterada e selecionou-se a opção *Use user-input gas quench rate* preenchendo posteriormente os espaços vazios. Os restantes valores foram também averiguados, no fundo ao longo de toda esta fase confirmaram-se sempre os valores.

Posteriormente a secção de *HPS Data* serve para especificar informação acerca dos separadores de Alta Pressão onde não se efetuou nenhuma alteração e o original encontra-se abaixo.

Operating Data

Convergence Target
Recycle Gas Target
Reactor Data
Reactor Bed Data
Pressure Drop Data
HPS Data
Economic Data
Miscellaneous Data
Tolerances
Feed Data
Recycle Data
Solution Estimates
Reactor Scaling

	HPS S1
Treat Gas H2 Purity [mol %]	96.4809
Vent Gas Flow [km ³ /h]	1.116e-005
Quench Gas T [C]	66.01
Recycle Compressor Discharge P [bar_g]	173.8
Makeup Compressor Discharge P [bar_g]	174.1
NH3 in Vent [vol %]	<empty>
Makeup Compressor Inlet P [bar_g]	22.34
Makeup Compressor Inlet T [C]	26.14

HPS S1 Separators

☐ 1 Flash Drum
☒ 2 Flash Drums

Hot Drum P [bar_g]	153.3
Hot Drum T [C]	228.5
Cold Drum P [bar_g]	151.3
Cold Drum T [C]	46.85

Design Operating Data Calibration Worksheet Results

Delete OK Run Stop Ignored

Figura 3.11 - HPS, Operating Data Hydrocracker

Relativamente às restantes secções foram mantidas com os valores que tinham apenas a secção *Recycle Data* sofreu uma pequena alteração, abaixo está a imagem da mesma.

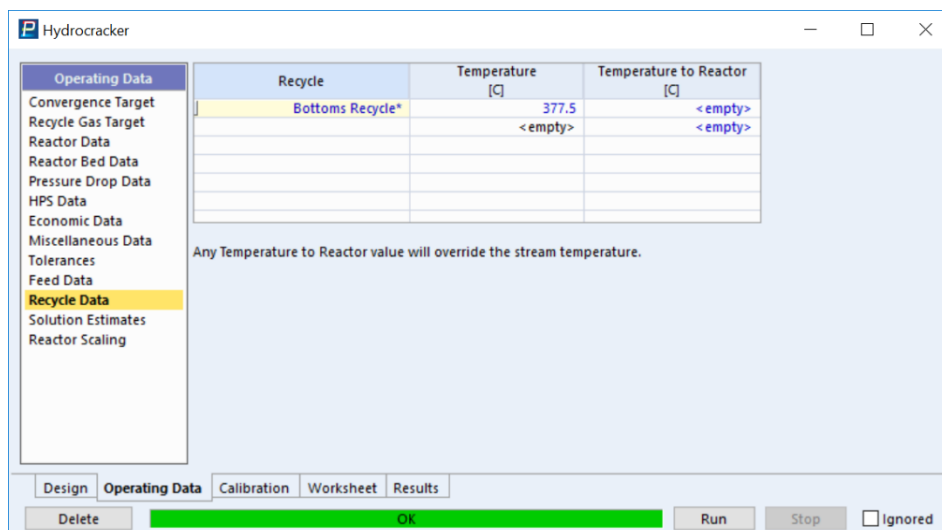


Figura 3.12 - Recycle Data, Operating Data Hydrocracker

A temperatura foi alterada de acordo com os dados que existiam acerca da temperatura de fundo do reciclo. Nos anexos encontram-se mais algumas secções que apesar de não se terem modificado se encontravam definidas.

Após estas alterações não se efetuou mais nenhuma dentro do separador do reator. No entanto apesar de todos estes dados adicionados ao processo, as quantidades de UCO mantiveram-se altas comparadas com os valores reais.

Para conseguir diminuir esta quantidade de UCO foi necessário aumentar a conversão do processo, *Overall HCR Conversion*, para 98%, o que de certa forma vai de encontro aos valores que existem da conversão do processo na literatura.

Para efetuar a validação do modelo foi necessário comparar novamente os rendimentos reais com os da simulação.

No anexo I encontram-se mais em pormenor o resto das secções.

3.1.3 Dashboard

Nesta fase considerou-se que o modelo é adequado e representa corretamente a unidade atual, tendo-se considerado o modelo validado e calibrado.

Dada esta situação iniciou-se o desenvolvimento de *dashboard*, para a criação da mesma selecionaram-se inicialmente variáveis que caracterizassem a carga tais como: a curva TBP, a % em massa de enxofre e azoto, e algumas variáveis operacionais tais como o caudal, a temperatura e a pressão.

Para criar a *dashboard* colocou-se na mesma dois botões que permitem a navegação entre dois ficheiros. Um dos ficheiros tinha como objetivo comparar dois cenários implementados enquanto que o outro era focado para a análise de sensibilidade.

Para os valores de input efetuou-se um link, ou seja, uma ligação entre as células e os valores do *predict input(workbook)*. Relativamente aos dados gerados no *predict result*, respostas da simulação, estes encontravam-se ligados aos gráficos.

Nesta 1ª fase seguiu-se a metodologia que se encontra representada pela figura 3.4. a pequena diferença é o facto de neste modelo não ter sido utilizado o excel de integração.

Seguidamente comparou-se as quantidades de produtos do Petro-SIM™ com as quantidades efetivamente reais dos produtos.

Os valores de simulação encontravam-se próximos dos reais, no entanto considerou-se que ainda era uma diferença decimal com os valores reais e por isso não se pode concluir que o modelo estava validado.

3.2.2 Sigma Fine

Os balanços diários que são feitos no departamento do processamento de dados na refinaria são feitos tendo em conta “fatores” de reconciliação entre os balanços, ou seja, fatores que alteram os valores dos produtos conseguindo desta forma acertar os balanços

Estes fatores de reconciliação são atribuídos por um programa designado *SigmaFine*, o principal componente deste programa é um servidor especializado que valida as informações de produção, verifica a qualidade dos dados do processo e auxilia na consolidação dos dados de processo e fabricação de um conjunto de dados consistente e fidedigno.

Para chegar ao seu objetivo o *SigmaFine* utiliza uma abordagem matemática bastante rigorosa para reconciliar os dados iniciais do processo e gerar um conjunto de dados operacionais. Este conjunto de dados é então publicado para usuários, sistemas e outras ferramentas de análise através do *SigmaFine Server*.

Com os referidos fatores os ajustes dos balanços de processo são assim implementados com rapidez e confiança evitando erros que poderiam surgir sem a utilização deste programa.

Após se ter em conta estes fatores de reconciliação nos valores reais, os valores de produtos obtidos pela simulação eram efetivamente idênticos aos reais.

3.2.3 Calibração do FCC

Posteriormente para calibrar o modelo foi necessário utilizar o Modelo Standard de Calibração, “Calibrate”, do Petro-SIM™. No entanto, a calibração do Petro-SIM™ utiliza os valores das seções dos *meter's* tanto das unidades como das correntes.

O *meter* aceita *input's* tal como quando se define uma unidade ou corrente, contudo, não os altera ao longo da simulação, o que possibilita a comparação de valores iniciais com os calculados pela simulação, na figura 3.14 encontra-se o *meter* da carga ao FCC.

A calibração do Petro-SIM™ utiliza os valores do meter não só da carga, mas também dos produtos, desta forma retiraram-se os valores do *test-run* relativos aos produtos para assim completar os meter's dos mesmos. Os dados do *test-run* foram assim utilizados, em relação às outras variáveis que caracterizavam as correntes, mas não havia amostras continuaram a usar-se valores definidos pelo modelo já validado anteriormente.

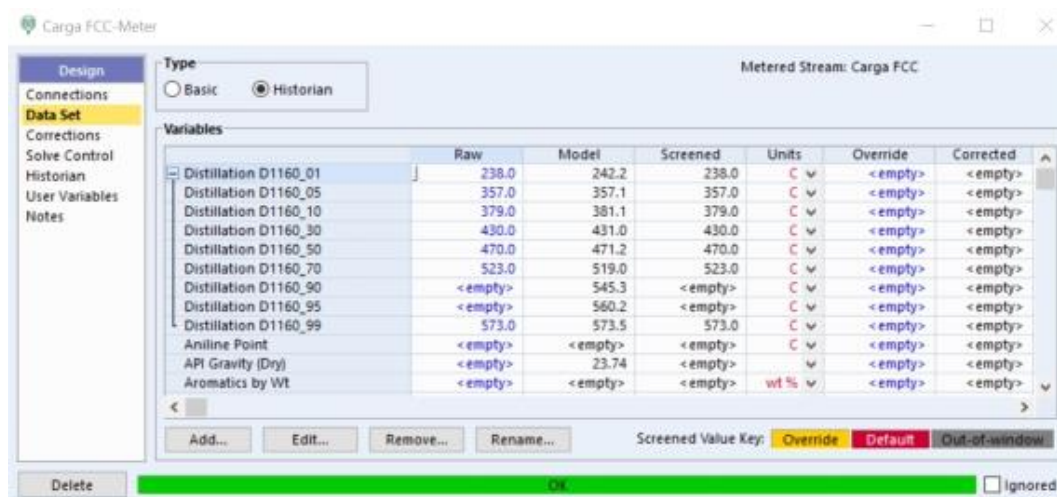


Figura 3.14-Meter da carga ao FCC

Também foi necessário adicionar ao meter da unidade do FCC os valores do reator e regenerador.

Para o regenerador selecionou-se: a pressão do mesmo, as temperaturas de topo e do *flue gas*, da fase diluída e da fase densa. Ainda dentro do reator recolheu-se a temperatura do ar e caudal do mesmo.

Relativamente ao reator colocou-se a pressão do topo, temperatura dos vapores de topo e os caudais mássicos de vapor dos strippers. A razão pela qual se define características no topo é devido ao facto de serem extremamente importantes pois consegue-se traçar o perfil de temperaturas ao longo do reator e nesta zona apresentam-se com os valores mais baixos. Adicionalmente ocorre nesta zona a maior parte da separação do catalisador e hidrocarbonetos.

Por fim ainda se colocaram alguns valores da coluna de fracionamento tais como a pressão de topo e a pressão após a saída. Após adicionar estes valores tornou-se viável e correto avançar na fase de calibração.

RECONCILE	Após se clicar no "Reconcile!" o Petro-SIMTM altera alguns valores com o objetivo de fechar o balanço de massa. Mostrando posteriormente os valores reconciliados com as respectivas tolerâncias.
VALIDATION	A validação é nas diferentes etapas de síntese de modo a validar os dados das mesmas .A validação pode ser feita opcionalmente sempre que se desejar verificar os dados antes de calibrar.
CALIBRATION	A calibração sintetiza os dados, calibra os reatores, demonstrando no Petro-SIMTM o progresso de toda a calibração.

Figura 3.15 – Etapas do Calibrate do Petro-SIM™

3.2.4 Catalyst Cooler

Para adicionar o *Cat Cooler* na simulação foi necessário alterar a configuração do reator, desta forma modificou-se nos *targets* do separador “Regen Targets”.

A escolha da data recaiu sobre o dia 8 de Maio devido ao correto funcionamento do *Cat Cooler* neste período conseguindo desta forma reunir um cenário que traduzisse a realidade.

Após a escolha da data reuniu-se novamente todos os dados referidos na fase de validação e por fim foi necessário verificar os valores de vapor que se formaram no *Cat Cooler*. O valor de vapor é necessário para que se consiga verificar se o modelo está a simular corretamente.

Inicialmente na simulação o target era o rácio de CO₂ do *flue gas* mas no entanto para se adicionar o *Cat Cooler* foi necessário alterar para a opção “Bed with Heat Removal”. Para esta opção havia duas alternativas de conjunções:

- Bed with Heat Removal + Flue gas O₂
- Bed with Heat Removal + Air Rate

Apesar de ambas as opções estarem disponíveis utilizou-se a primeira pois havia valores reais disponíveis nas mesmas unidades de % vol.

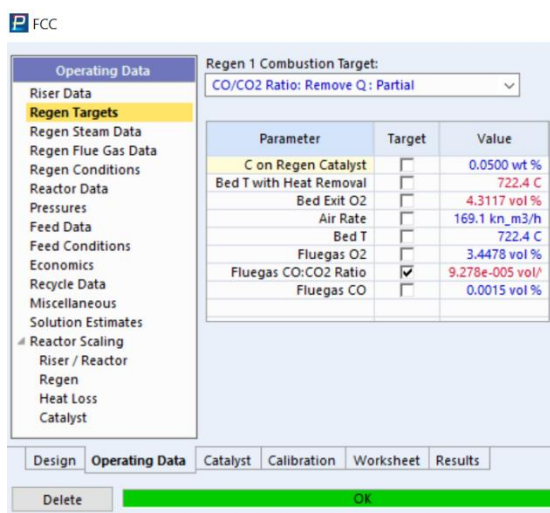


Figura 3.16 – Modelo Anterior do FCC

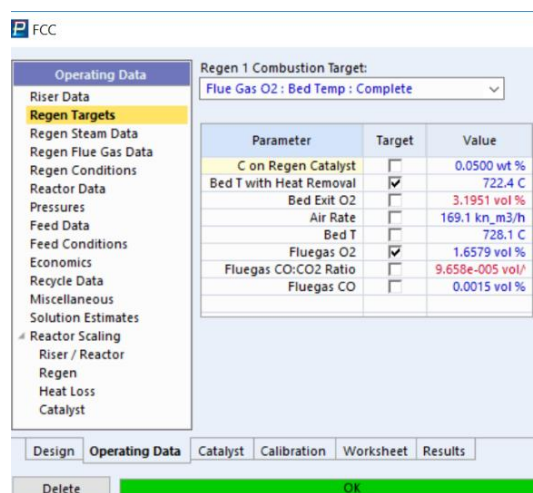


Figura 3.17 – Nova configuração do Modelo do FCC

Contudo esta não foi a única alteração efetuada, também se alterou uma das especificações do reator. Na figura 3.18 está assinalada a *target* nos valores de vapor para o catalisador em tonelada por hora, no entanto, como havia dados relativos aos vapores no momento escolhido, estes foram colocados na simulação.

The screenshot shows the FCC software interface. On the left is a navigation tree with categories like Operating Data, Reactor Data, Pressures, Feed Data, etc. The 'Catalyst Stripper Specification' section is active, showing three radio buttons: 'Fixed Stripper Steam Rate' (selected), 'Fixed Steam to Catalyst Ratio', and 'Fixed Occluded Coke Fraction'. To the right is a table with columns 'Parameter', 'Target', and 'Value'. The 'Stripper Steam Rate' parameter has its 'Target' checkbox checked and a value of 8.901 tonne/hr. Below this is a 'Data' section with a table of parameters and their values.

Parameter	Target	Value
Stripper Steam Rate	<input checked="" type="checkbox"/>	8.901 tonne/hr
Steam to Catalyst Ratio	<input type="checkbox"/>	1.274
Occluded Coke Fraction	<input type="checkbox"/>	0.1500

Data	
Cat Stripper Steam T [C]	280.0
Cat Stripper Steam P [bar_g]	10.50
Bed Steam Rate [tonne/hr]	< empty >
Bed T [C]	< empty >
Dome Steam Rate [tonne/hr]	2.000
Dome Steam T [C]	280.0
Dome Steam P [bar_g]	10.50
Reactor Catalyst Bed Level [bar]	< empty >
Stripper Catalyst Bed Level [bar]	< empty >

At the bottom of the window are tabs for Design, Operating Data (selected), Catalyst, Calibration, Worksheet, and Results. Below the tabs are buttons for Delete, a green OK button, Run, Stop, and an Ignored checkbox.

Figura 3.18 – Target dos valores de vapor

Estas duas últimas alterações foram efetuadas apenas com o objetivo de aproximar o modelo à realidade.

O principal foco durante esta etapa de implementação do *Cat Cooler* foi a denominada “Bed Cooling Water” que se encontrava no separador dos “Results”. Esta variável traduzia nas unidades de Gcal/hr a energia retirada pelo *Cat Cooler*.

3.3 Programação em R

3.3.1 Unidade de Hydrocracker

As análises semanais que se designam mais usualmente por *test-run* são efetuadas todas as semanas a cada uma das unidades. Os *test-run* consistem na recolha de amostras de todas as correntes principais (matérias primas, produtos, correntes intermédias) no sentido de existir uma visão criteriosa do desempenho atual da unidade.

Apesar deste controlo que é feito podem ainda assim decorrer eventos, como por exemplo mudanças de carga que alteram significativamente o perfil e características dos produtos, o que pode apenas ser visível algum tempo depois aquando do *test-run*.

A presente dissertação pretende criar *dashboards* online que permitam aos operadores de consola realizar simulações a qualquer altura com os dados mais atualizados possível. Para a simulação as propriedades da carga são determinantes e os dados historizados mais recentes podem não ser os mais relevantes (devido por exemplo a uma mudança de carga). Desta forma, é interessante se se conseguir definir um sistema expedito que permita aproximar as propriedades da carga a qualquer momento no sentido de maximizar a performance da simulação.

A unidade de *Hydrocracker* da refinaria de Sines recebe carga de duas origens diferentes: da unidade de Destilação de Vácuo e de dois tanques.

A unidade de Destilação de Vácuo gera diferentes produtos tais como o gasóleo de vácuo sendo parte dele reencaminhado para a unidade do *Hydrocracker*. No percurso que efetua até à unidade junta-se com a corrente proveniente de um dos tanques como está representado na seguinte imagem simplificada:

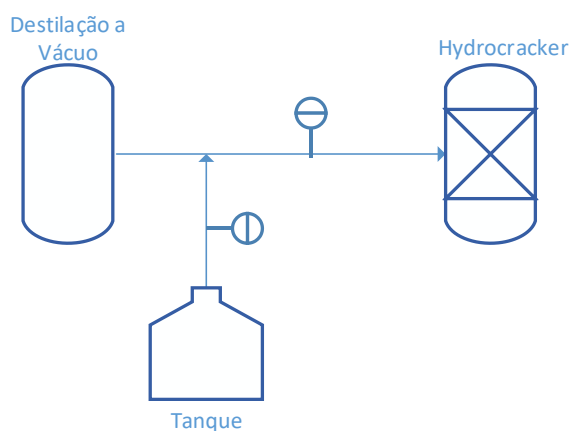


Figura 3.19-Esquema representativo da recolha de amostras

É importante referir que apesar de terem origens diferentes ambas as cargas contribuem de igual forma, ou seja, cada uma perfaz 50% da carga final.

Deste modo retirou-se as medições dos tanques 424 e 425 que contêm gasóleo de vácuo armazenado que pode ter diversas origens, tal como importações Refinaria de Matosinhos ou eventualmente proveniente da Destilação de Vácuo da Refinaria de Sines que é produzido e posteriormente armazenado no tanque. Por último esporadicamente podem ainda ter origem em exportações com origens no Mar do Norte.

Posteriormente foi necessário efetuar a recolha dos dados referentes à carga total do *Hydrocracker*, estes dados são medidos imediatamente antes da unidade como se ilustra na figura 3.19.

Devido ao facto de se recolher os dados dos tanques e da entrada no *hydrocracker* existe ainda a possibilidade de se conseguir prever o perfil da corrente de saída da destilação de vácuo ou eventualmente identificar características da mesma.

Ainda assim recolheu-se os dados da amostra da carga à destilação de vácuo com o objetivo de averiguar se se conseguiria estabelecer algumas semelhanças entre esta carga e a do *hydrocracker*.

Para uma análise mais precisa e correta as amostras recolhidas datam de 2013 até março de 2019 o que contribuiu para uma base de dados bastante vasta.

O sistema que se pretende instalar irá relacionar:

- Propriedades analisadas regularmente (densidade e enxofre) com as demais propriedades analisadas (Destilação, Azoto, etc);
- Relacionar as propriedades da matéria prima existente no tanque e a matéria prima alimentada realmente à unidade tendo em conta que:
 - É alimentada carga diretamente sem ser analisada;
 - Os tanques podem encontrar-se estratificados. A estratificação dos tanques é a formação de camadas com diferentes densidades (e outras propriedades) ao longo da altura do tanque.;

Após esta recolha recorreu-se ao programa de simulação R para tentar identificar possíveis correlações.

Para qualquer análise efetuada nesta fase foi necessário criar uma base de dados com os valores das variáveis para as mesmas datas, neste caso utilizou-se a função *match* no R. Para alguns casos aleatoriamente construiu-se histogramas com 2 tipos de dados para verificar alguma relação.

Para verificar as correlações foram efetuados dois tipos de testes:

- Regressão linear;
- Teste de previsão.

O teste de previsão consistia basicamente numa seleção de 70% dos dados e posterior tentativa de previsão dos restantes 30%. Nos quadros seguintes encontra-se um pouco do método em questão.



Numa primeira abordagem foi feita uma análise aos dados do *test-run* com o objetivo de verificar relações entre os mesmos. No sentido de investir um pouco mais nesta análise efetuou-se também uma análise aos compostos da carga. Finalmente verificou-se as relações entre a carga do HC com as correntes dos tanques e a carga da destilação a vácuo.

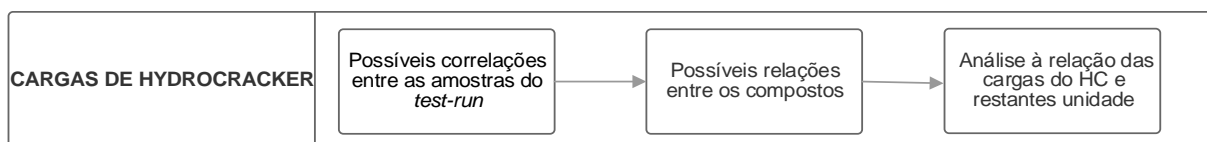


Figura 3.20 – Esquema representativo das tarefas

3.4 Splitter de propileno

3.4.1 Técnicas de Destilação

Para iniciar esta fase de construção de um modelo de *splitter* de propileno foi necessário e bastante importante fazer uma breve pesquisa bibliográfica com vista a verificar as melhores técnicas e procedimentos para o desenho do mesmo.

O objetivo desta fase é a construção do modelo do *splitter* de propileno, numa primeira abordagem apesar de se saber qual a opção mais económica foram recolhidos artigos científicos com os dois sistemas possíveis, *Heat Pumped System* e *High Pressure System*.

3.4.2 Caso de estudo: High Pressure System

Para uma abordagem mais completa foi importante seguir um caso e desta forma utilizou-se o seguinte artigo *Simulation and Performance Analysis of propylene-propane splitter in Petroleum Refinery Case Study*. [63]

O presente artigo contempla o caso *High Pressure System* e na tabela 3.1 encontram-se as condições operatórias e físicas que foram utilizadas para iniciar a simulação, selecionou-se a equação de estado de *Peng Robinson*.

Inicialmente colocou-se a alimentação fornecida pelo artigo que está explícita na tabela 3.1, juntamente com os parâmetros definidos para a coluna.

Tabela 3.1 - Correntes com todos os parâmetros colocados

Parâmetros	Alimentação	Parâmetros	Coluna
Fração em Vapor	1	Número de pratos	150
Temperatura (°C)	53	Pressão Condensador	17.22
Pressão(bar)	18.23	Pressão revaporizador	19
Caudal Molar(kgmole/h)	290.70	Entrada de Alimentação	52
Caudal Mássico (kg/h)	12344.37	Fração de Saída	0.946
Caudal Volumétrico (m3/h)	23.82	(Especificação Imposta)	
Fração Molar			
Propileno	0.81		
Propano	0.19		

Na figura 3.21 encontra-se uma imagem do ambiente do Petro-SIM™ com os parâmetros já definidos.

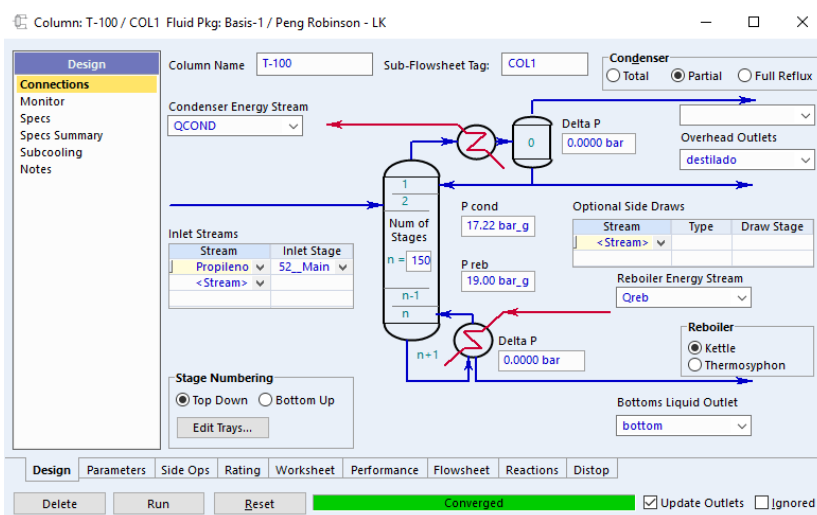


Figura 3.21 – Coluna já definida com os respectivos inputs.

Verificou-se as correntes de saída e respetivos valores e conclui-se que o modelo estava validado, no entanto, considerou-se importante e vantajoso efetuar a simulação do mesmo sistema de *high pressure* mas com outro artigo diferente e por isso utilizou-se o artigo *Optimization of Propylene-Propane Distillation Process*. [64]

A principal diferença é a equação de estado utilizada, neste caso utilizou-se a *Soave Redlich-Kwong*. Este modelo termodinâmico foi escolhido segundo os autores devido ao facto de ser utilizado em sistemas com hidrocarbonetos que contêm gases tais como CO_2 e N_2 . Relativamente à coluna existem alguns pormenores ligeiramente diferentes tais como a saída de propileno ser efetuada no prato 24 e não após o condensador. Esta coluna efetua refluxo total e contém apenas no condensador uma corrente de gás, esta particularidade está relacionada com a quantidade de componentes leves que estão no topo da coluna, que podem posteriormente envenenar o catalisador. Para maior detalhe o esquema da coluna encontra-se na figura 3.22.

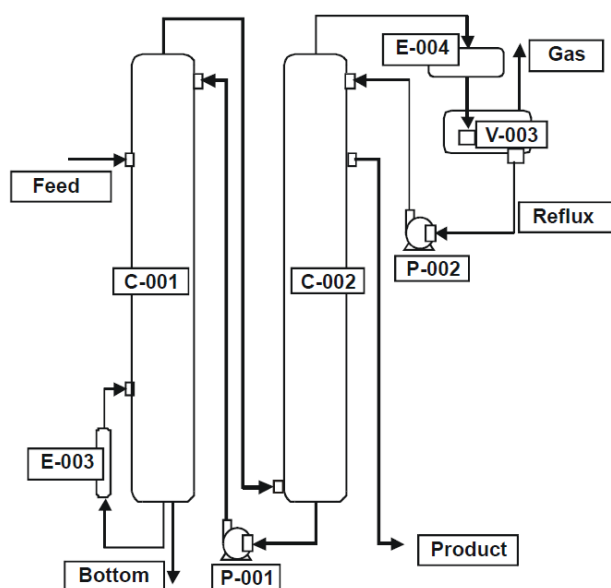


Figura 3.22 - Esquemática do processo

Novamente utilizou-se todas as condições operatórias fornecidas pelo artigo que se encontram apresentadas na tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Inputs do processo.

	Número de pratos	Pressão Condensador	Pressão revaporizador	Entrada de alimentação	Fração de saída	Temperatura
Valores	241	16.56 bar	17.56 bar	156	0.9929	Prato 1-42°C Prato 241-49.2°C
					Especificações Impostas	

Relativamente à pressão o artigo apresentava um intervalo de pressões de 15.95 até 17.56 bar, escolheu-se o intervalo de pressões com valores mais altos de 16.56 até 17.56 devido às pressões que foram anteriormente simuladas serem também mais altas. Já o intervalo é de menor amplitude pois a destilação é favorecida por uma menor queda de pressão [65].

Em relação à temperatura foram impingidas especificações necessárias por causa dos graus de liberdade apesar de se ter seguido sempre o artigo.

A alimentação foi de certa forma manipulada pois no artigo utilizado apresentava-se uma corrente de alimentação com um total de 5496 kg/h com quantidades residuais de diferentes compostos tais como hidrogénio de 0.13 kg/h devido a esta quantidade tão irrisória não se considerou nenhum dos componentes que se apresentavam com quantidades na mesma ordem de grandeza. A solução foi considerar apenas os compostos seguintes: propileno, propano e butano da seguinte forma:

Tabela 3.3 – Alternativa utilizada para nova alimentação

	Alimentação antiga	Alimentação nova/alterada	Fração em massa
Hidrogénio	0.13		
Nitrogénio	1.76		
Etano	0.16		
Propano	178.73	178.73	0.0325
Propileno	5304.48	5304.48	0.9670
Butano	2.2	2.2	0.0004
Heptane	8.54		
Total	5496	5485.41	1

Após a simulação destes dois casos de estudo foi interessante selecionar um deles e tentar simular com a corrente real de propileno do modelo do FCC. Arbitrariamente selecionou-se o segundo modelo e começou por se adicionar um compressor devido à diferença de pressões entre a coluna e a corrente, de seguida encontra-se a figura 3.23 com as características da corrente.

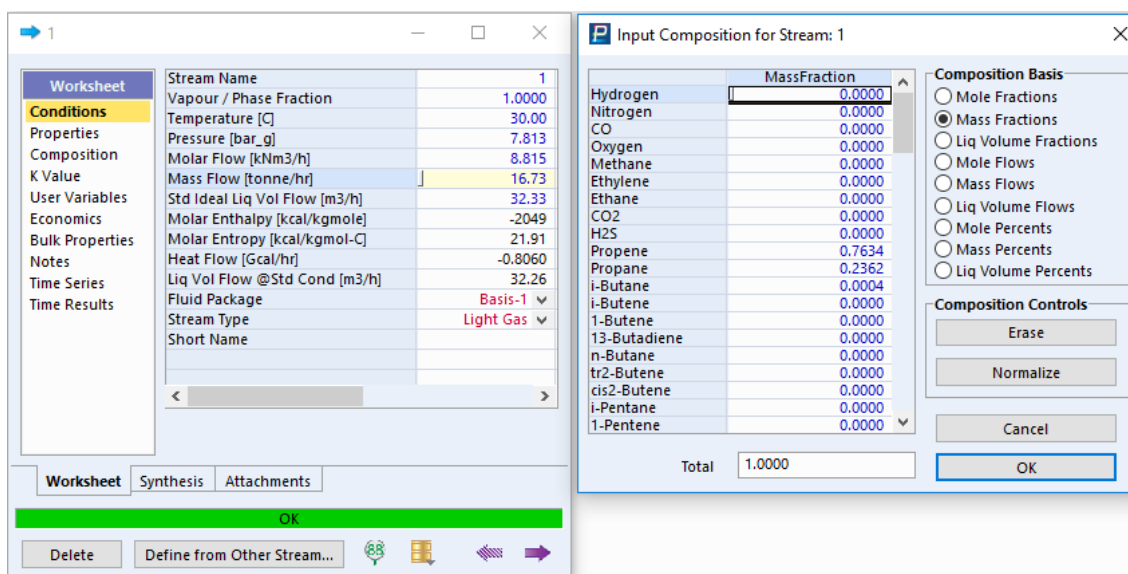


Figura 3.23-Características e inputs da corrente de propileno

Posteriormente colocou-se o compressor entre a corrente e a coluna como está representado na figura 3.24.

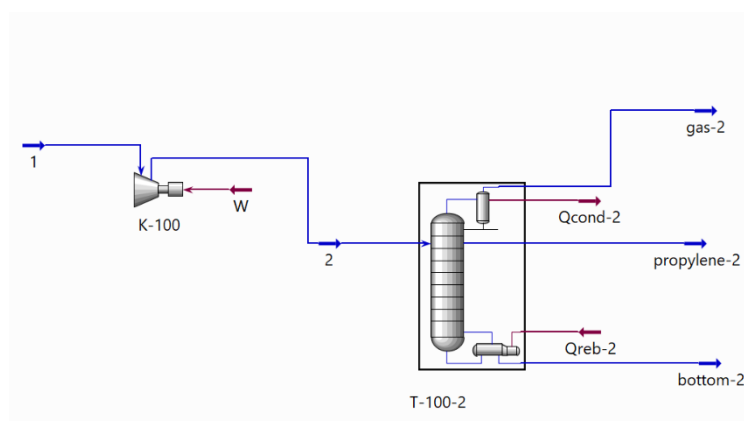


Figura 3.24-Esquema do novo processo com o compressor

Para definir o compressor foi necessário apenas colocar a pressão desejada na corrente de entrada antes da coluna. Definiu-se uma pressão de 18.56 bar para a corrente 2 isto por que a corrente opera no fundo a 17.56 bar, o compressor necessita assim de 0.2218 Gcal/hr.

3.4.3 Caso de estudo: *Heat Pumped System*

Para decidir qual o melhor sistema a escolher foi necessário ter em conta a integração a nível logístico da possível coluna de propileno. Normalmente se a coluna fosse colocada junto a uma planta de etileno que por norma contém *quench water* o *High Pressure System* seria uma opção viável visto que iria utilizar-se essa água no revaporizador. No caso em estudo a unidade de propileno fica inserida na unidade de FCC, que não possui nenhuma fonte de calor suficiente, o que faz com que a opção de *Heat Pumped System* seja a mais económica [49].

Para este caso utilizou-se o artigo *Conceptual design of an internally heat integrated propylene-propane splitter* que utiliza a equação de estado de *Peng Robinson*. A alimentação deste artigo difere um pouco das que foram utilizadas anteriormente devido ao facto da alimentação conter 37 % de vapor. As indicações dadas pelo artigo eram apenas a composição da corrente e a composição em vapor e em líquido, dito isto foi considerada a pressão da corrente sempre acima do valor de pressão de operação da coluna. Na tabela 3.4 encontram-se as características da corrente [66].

Tabela 3.4 – Perfil da carga

Alimentação	Fração em Vapor	Temperatura (°C)	Pressão (bar)	Caudal Molar (kgmole/h)	Caudal Mássico (kg/h)	Propileno	Propano
Valores	0.37	33.41	12.2	2597	112000	52%	47%

Relativamente à coluna começou por se definir o número de pratos, as pressões do condensador e caldeira e por fim a entrada da alimentação, esta última definida arbitrariamente considerando desta forma que a alimentação entraria exatamente a meio da coluna.

Tabela 3.5- Características da coluna

	Número de pratos	Razão de Refluxo	Pressão revaporizador	Pressão Condensador	Eficiência	
Valores	211	15	10 bar	11.2	91%	Temperatura

3.4.4 Caso de Estudo: C3 Splitter

Em paralelo à pesquisa dos diferentes artigos, verificou-se nos manuais de Petro-SIM™ se já existiria alguma unidade pré-definida de um separador de propileno e numa das janelas constatou-se que exista uma unidade denominada “C3 splitter”.

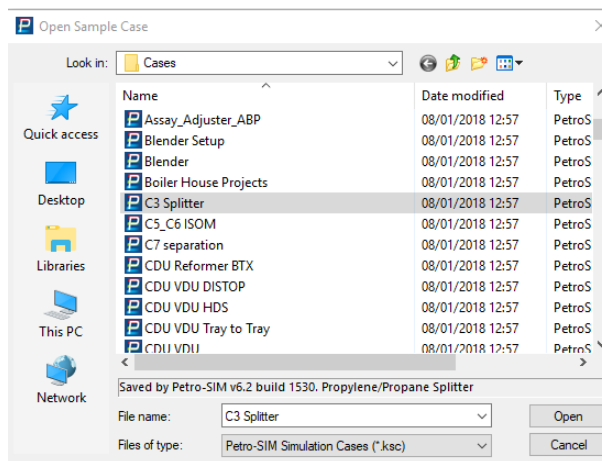


Figura 3.25-Casos do Petro-SIM™ em específico C3 Splitter.

3.4.5 C3 Splitter aplicado à respetiva corrente de propileno do FCC

Com este modelo já pré-definido foi pertinente implementar a corrente de propileno do modelo do FCC e analisar a coluna otimizando com este mesmo ponto de partida. Devido à necessidade do mercado a nível petroquímico ser de 95% de pureza de propileno alterou-se uma das especificações impostas.

Esta fase teve como objetivo verificar como se comporta o modelo construído pelo Petro-SIM™ e reunir as condições ótimas do mesmo. Na figura 3.26 encontra-se a coluna com maior pormenor, verifica-se então que tem uma coluna de retificação com 89 pratos e uma coluna de fracionamento com 94 pratos.

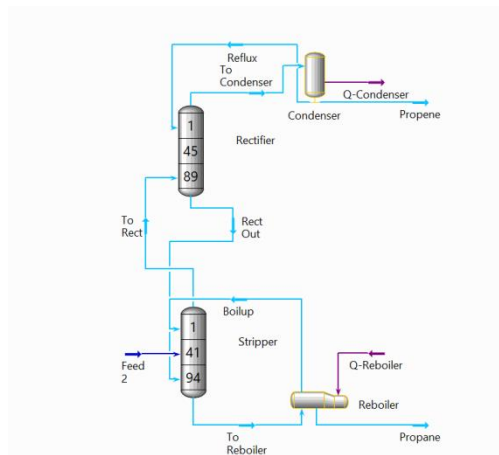


Figura 3.26-Coluna C3 *Splitter* pormenorizada

A análise de sensibilidade teve diferentes etapas que se encontram esquematizadas no esquema.

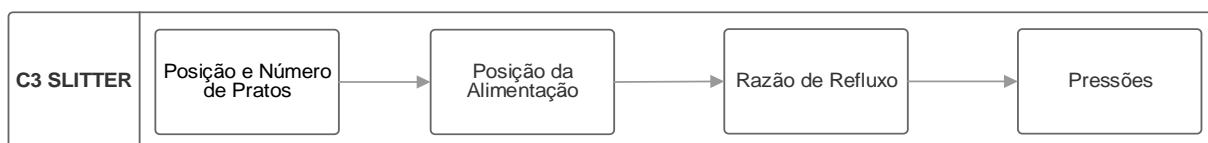


Figura 3.27 - Esquema das análises de sensibilidade realizadas

3.4.6 Heat Pumped System + C3 Splitter

Inicialmente antes de todo este estudo e simulação dos diferentes separadores de propileno foi feita uma pesquisa bibliográfica onde se verificou as diferentes técnicas de separação do propileno, e se concluiu que a melhor seria o *Heat Pumped System*. Esta foi a razão pela qual não fez sentido continuar uma avaliação quase económica do estudo anterior pois este novo sistema consiste em utilizar a energia da corrente de topo transferindo-a para a corrente de fundo utilizando somente um compressor para ampliar esta energia da corrente de topo.

Para esta fase encontrou-se um artigo bastante completo denominado *High-purity propylene from refinery LPG* que continha este sistema com uma secção extra, para uma melhor perceção encontra-se a imagem abaixo do mesmo [59].

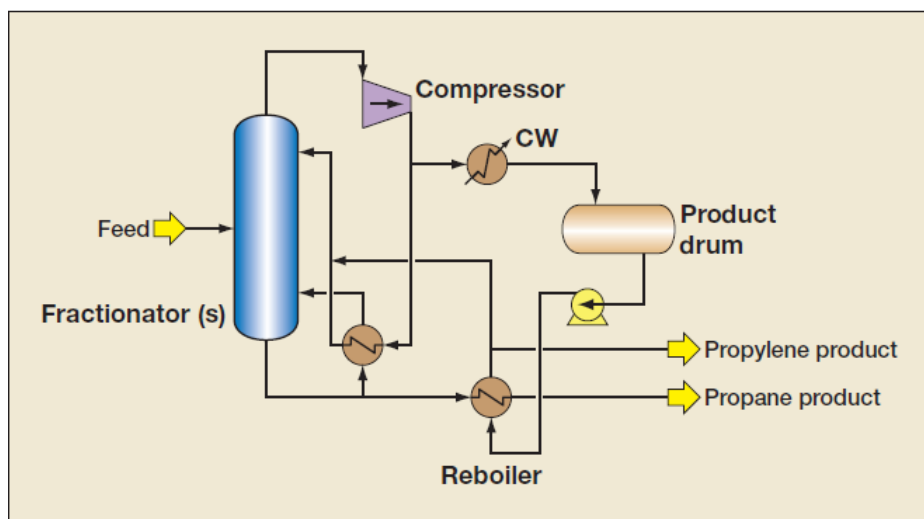


Figura 3.28-Heat Pumped System

Esta secção extra que contém um condensador, balão, bomba e revaporizador foi inicialmente implementada no Petro-SIM™ como está demonstrado.

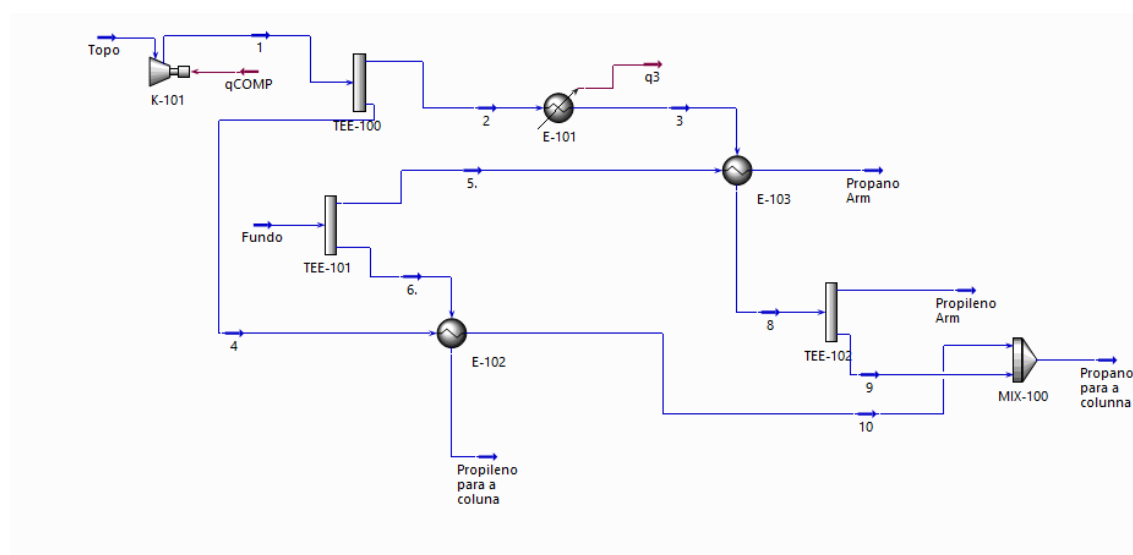


Figura 3.29-Esquema do *Heat Pumped System* sem a coluna principal

Tabela 3.6 – Unidades correspondentes às siglas

Nome	Unidade
K-101	Compressor à saída da coluna
TEE-100	Separador da corrente de propileno de topo
TEE-101	Separador da corrente de propano de fundo
TEE-102	Separador do propileno
MIX-100	Junção das correntes de propileno para a coluna
E-101	Condensador do propileno
E-102	Revaporizador
E-103	Revaporizador

Para efetuar a simulação utilizou-se todas as características do modelo de C3 *Splitter* e o modelo foi posteriormente validado.

O caso em questão foi então adaptado mantendo o compressor e o revaporizador 1 que efetua integração energética.

A razão pela qual se adaptou o sistema é pelo facto de não se conseguir encontrar uma vantagem em implementar o sistema por completo. Na seção 4.4.5 encontram-se todos os resultados destas novas alterações.

Seguiu-se uma nova análise de sensibilidade.

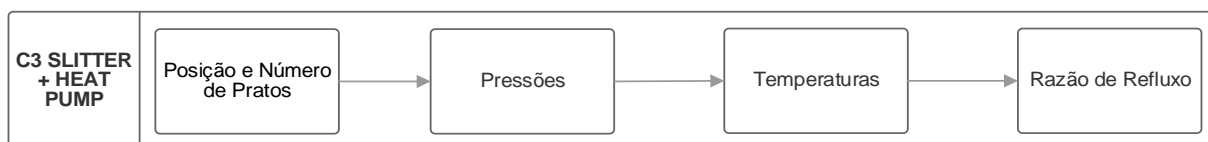


Figura 3.30-Esquema das análises de sensibilidade realizadas.

4 Apresentação e Discussão de Resultados Obtidos

4.1 Validação e Calibração do Modelo de HC

Segundo a metodologia da secção 3.1.1. procedeu-se à simulação com os dados para as respetivas quatro datas, posteriormente foram recolhidos os valores das curvas de destilação e de cada componente.

4.1.1 Análise às curvas de destilação

Como mencionado foi pertinente verificar se as curvas de destilação se encontravam próximas nas diferentes datas, visto que as mesmas influenciam diretamente as quantidades de cada componente e por sua vez os rendimentos. Para todos estes gráficos foi eliminada a primeira e última medição pois são pontos com pouca exatidão.

4.1.1.1 Nafta Ligeira Real VS Simulação

Nestas 4 figuras verifica-se que os dados da simulação e os reais assumem sempre o mesmo comportamento, pois a proximidade é bastante notória no final da ebulição. No início verifica-se um maior afastamento de dados, no entanto, não chega a ser significativo.

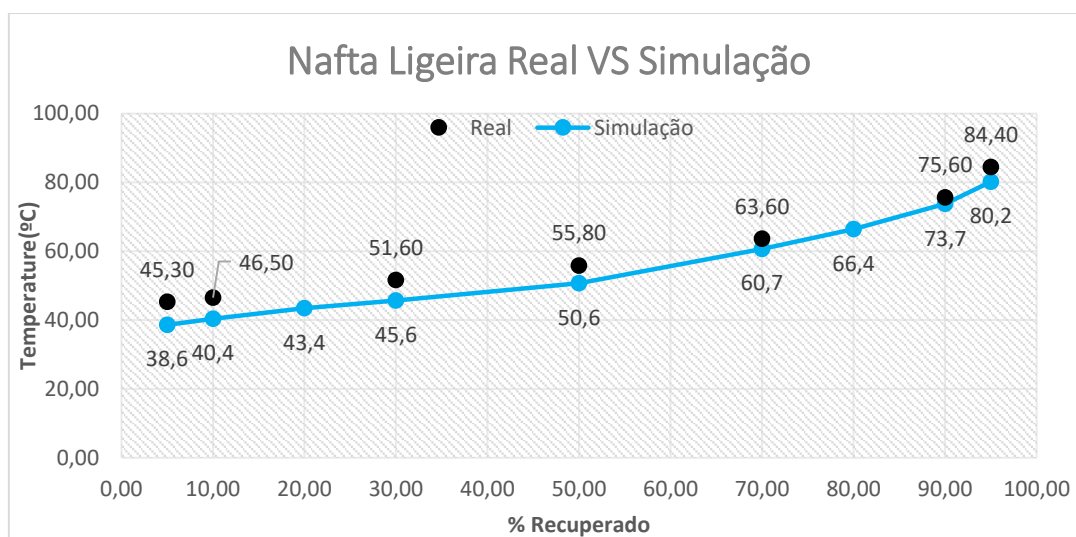


Figura 4.1- Nafta Ligeira Real VS Simulação 25/09/2018

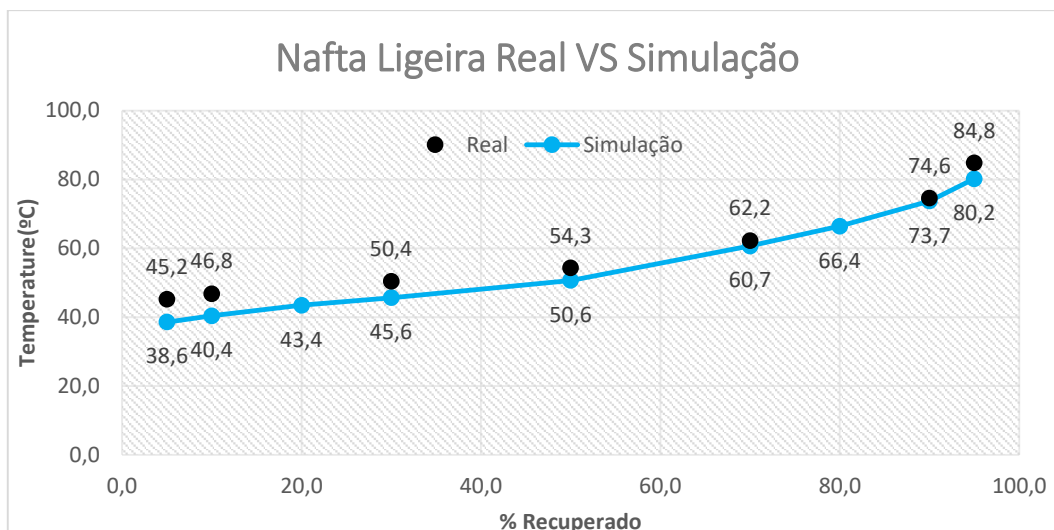


Figura 4.2--Nafta Ligeira Real VS Simulação 02/10/2018

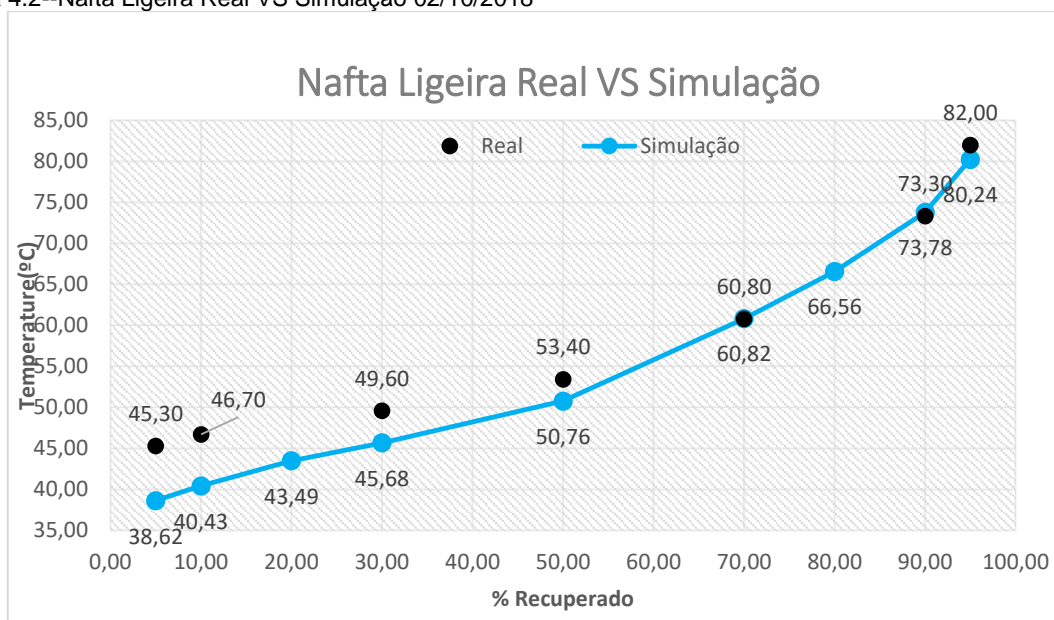


Figura 4.3- Nafta Ligeira Real VS Simulação 09/10/2018

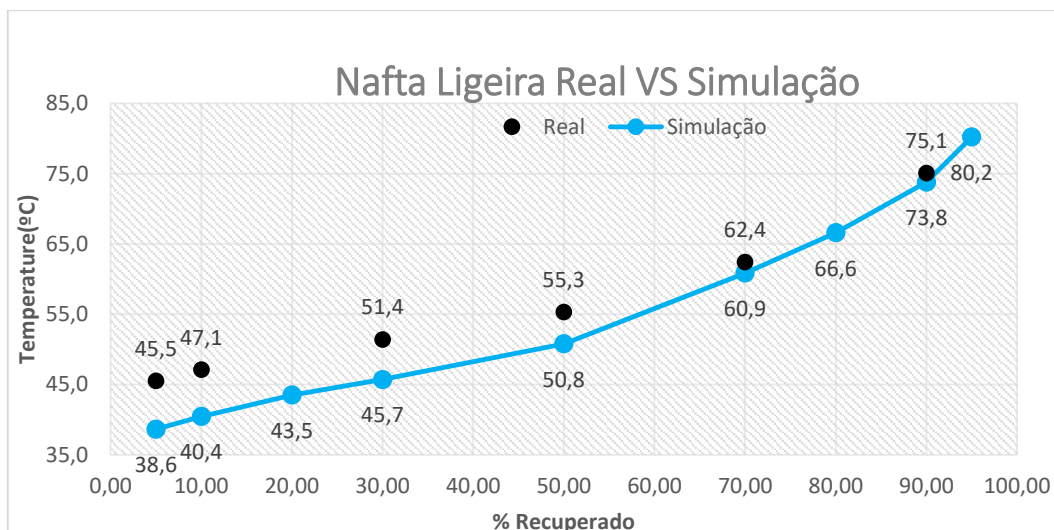


Figura 4.4 Nafta Ligeira Real VS Simulação 16/10/2018

4.1.1.2 Nafta Pesada Real VS Simulação

Tal como a nafta ligeira, a nafta pesada ao longo dos diferentes dias assume comportamentos idênticos no que toca à comparação da simulação com a real. No caso da nafta pesada verifica-se que no início a simulação não prevê valores tão altos como o real, no entanto depois ao longo da destilação a temperatura assume valores particularmente altos na simulação.

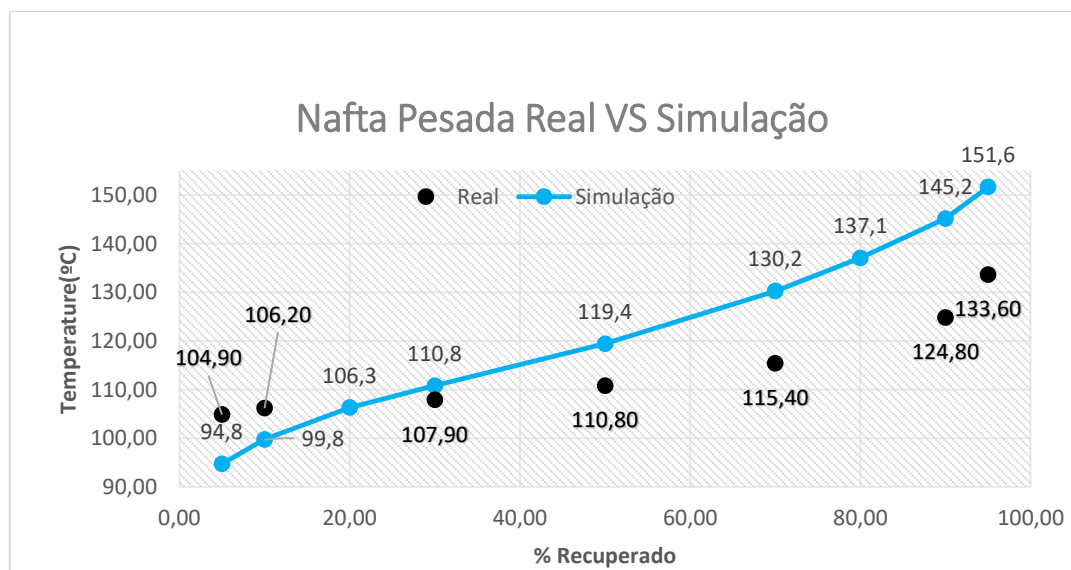


Figura 4.5 - Nafta Pesada Real VS Simulação-25/09/2018

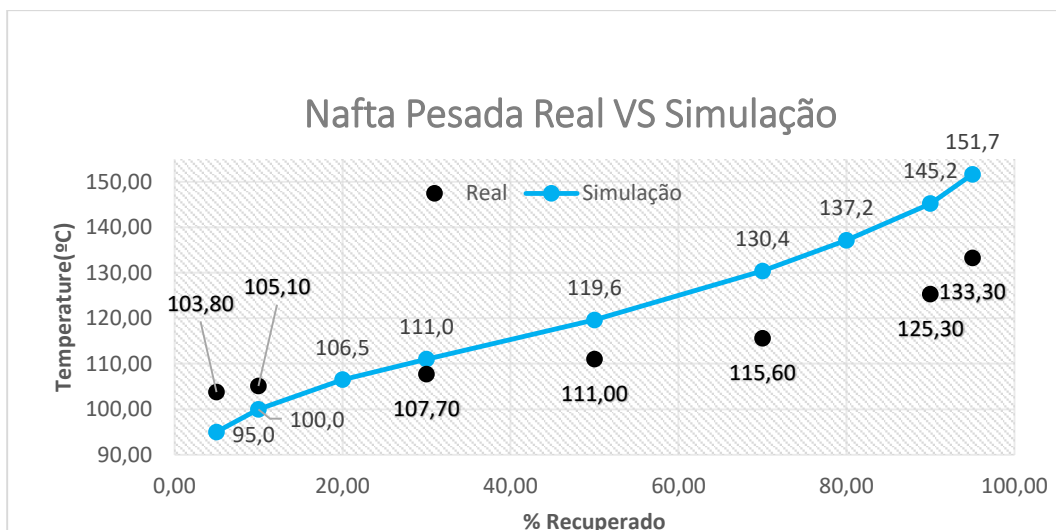


Figura 4.6 - Nafta Pesada Real VS Simulação-02/10/2018

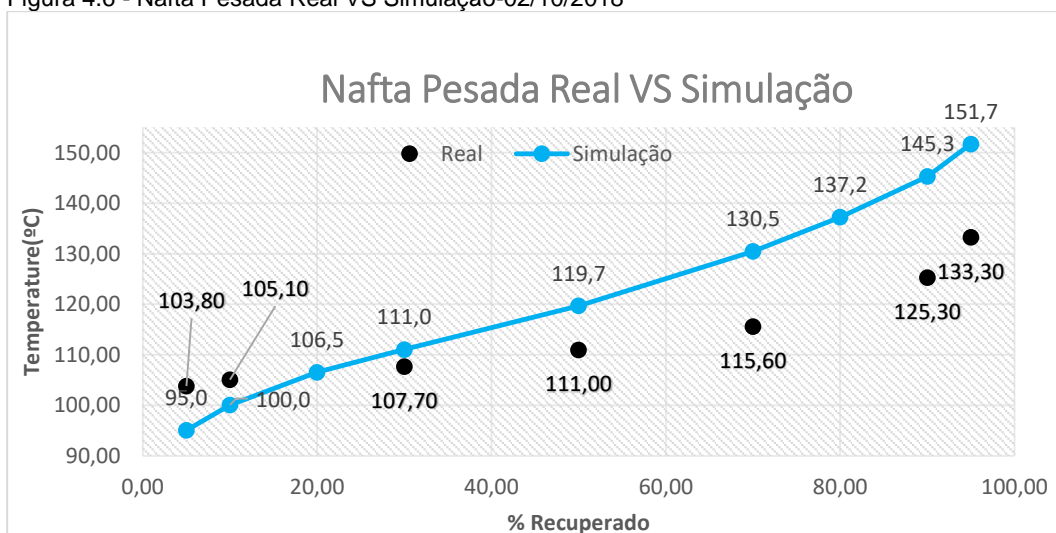


Figura 4.7 - Nafta Pesada Real VS Simulação-09/10/2018

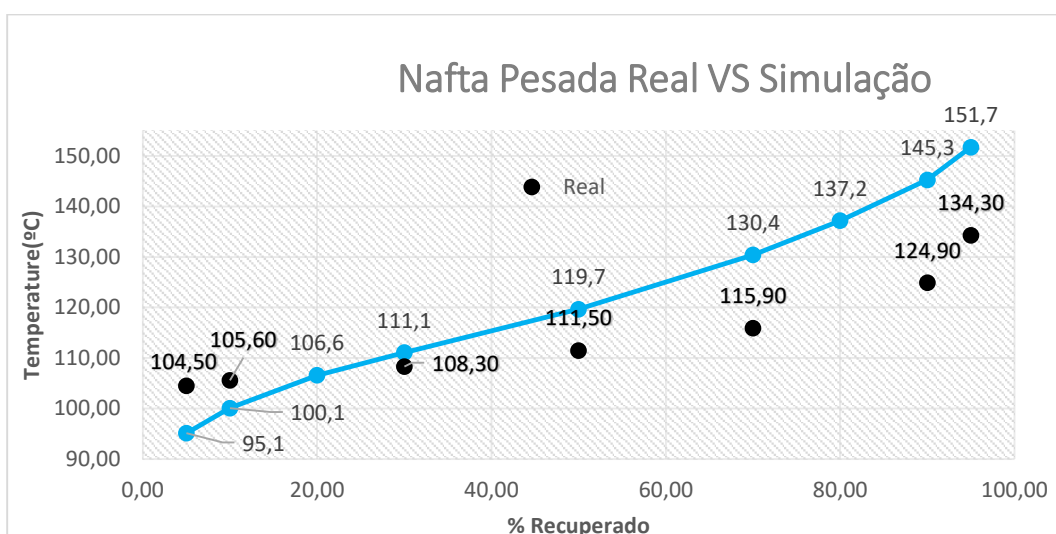


Figura 4.8 - Nafta Pesada Real VS Simulação-16/10/2018

4.1.1.3 Queroseno Real VS Simulação

As figuras seguintes mostram um comportamento idêntico entre os valores simulados e os reais e desvios mínimos que efetivamente são irrelevantes.

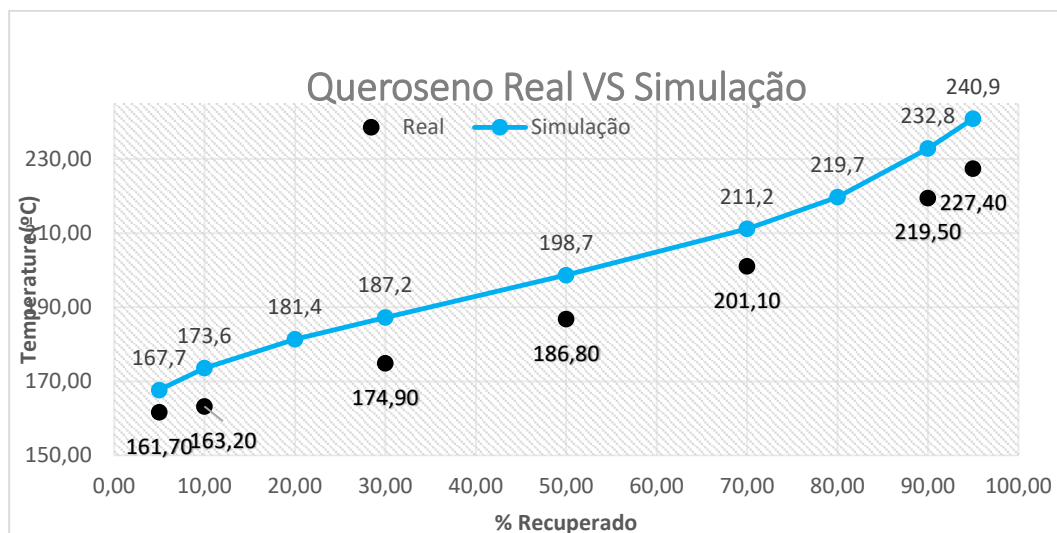


Figura 4.9 - Queroseno Real VS Simulação 25/09/2018

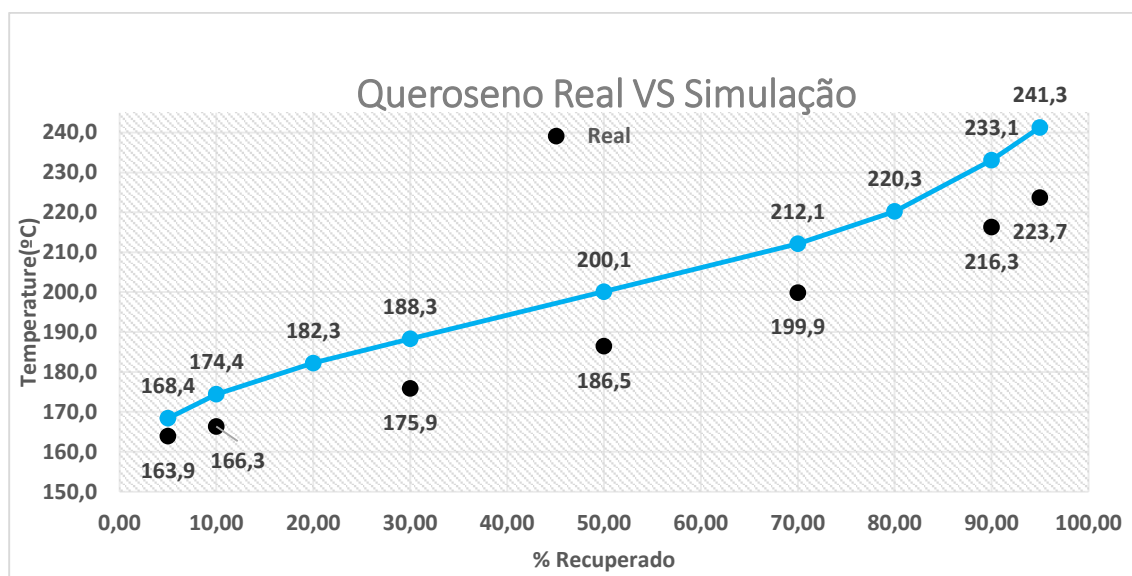


Figura 4.10 - Queroseno Real VS Simulação 02/10/2018

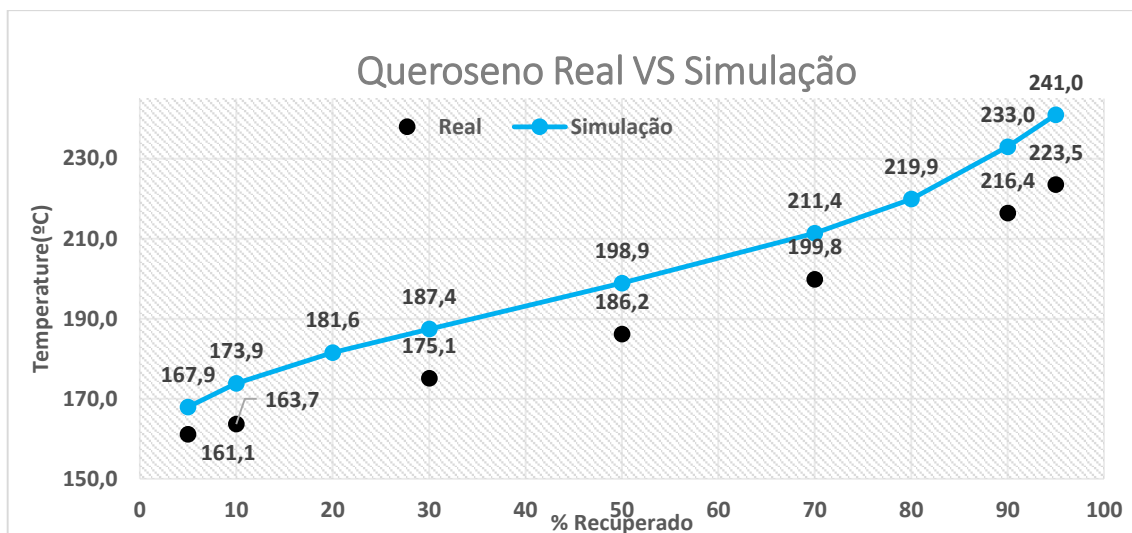


Figura 4.11 - Queroseno Real VS Simulação 09/10/2018

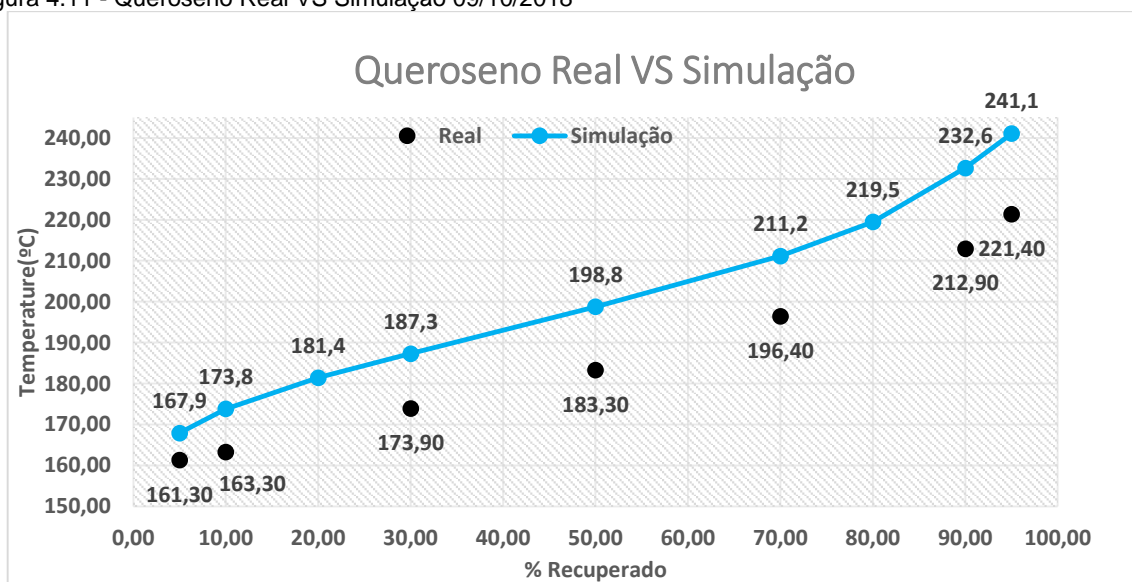


Figura 4.12 - Queroseno Real VS Simulação 16/10/2018

4.1.1.4 Gasóleo Real VS Simulação

Os resultados da simulação do gasóleo são os que demonstram maior proximidade com a realidade, o que se verifica com a quase sobreposição das linhas nas figuras seguintes.

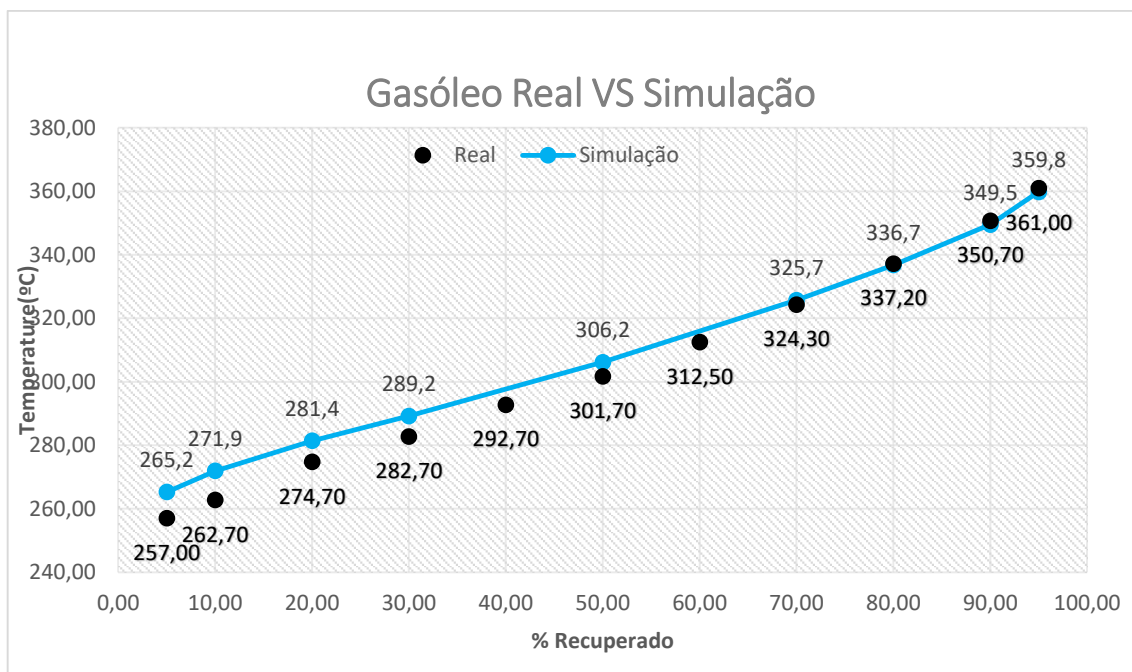


Figura 4.13 - Gasóleo Real VS Simulação 25/09/2018

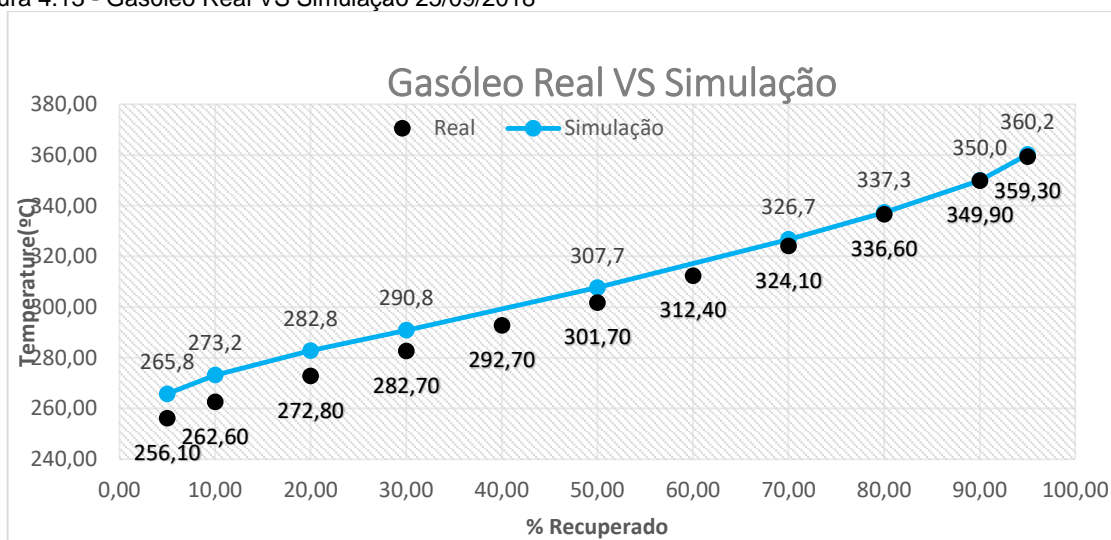


Figura 4.14 - Gasóleo Real VS Simulação 02/10/2018

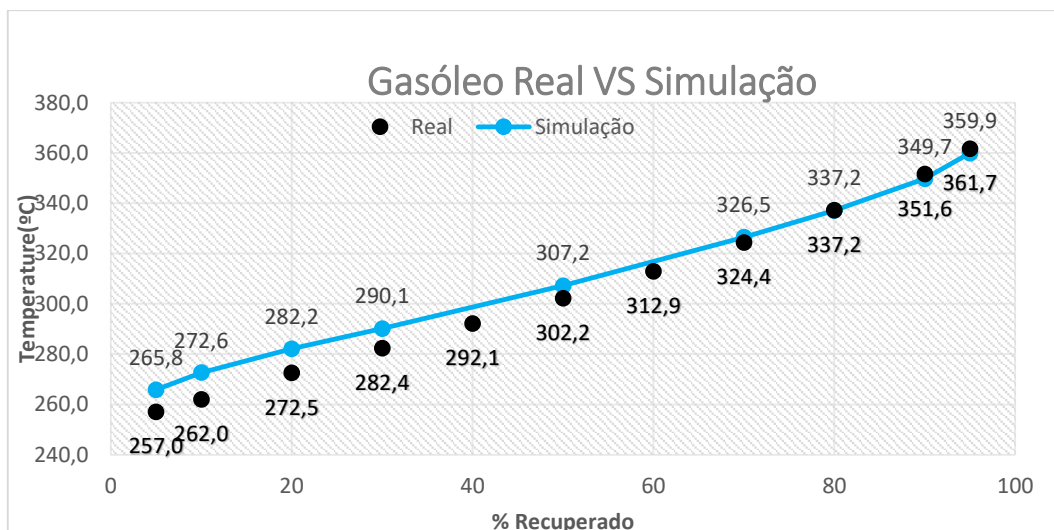


Figura 4.15 - Gasóleo Real VS Simulação 09/10/2018

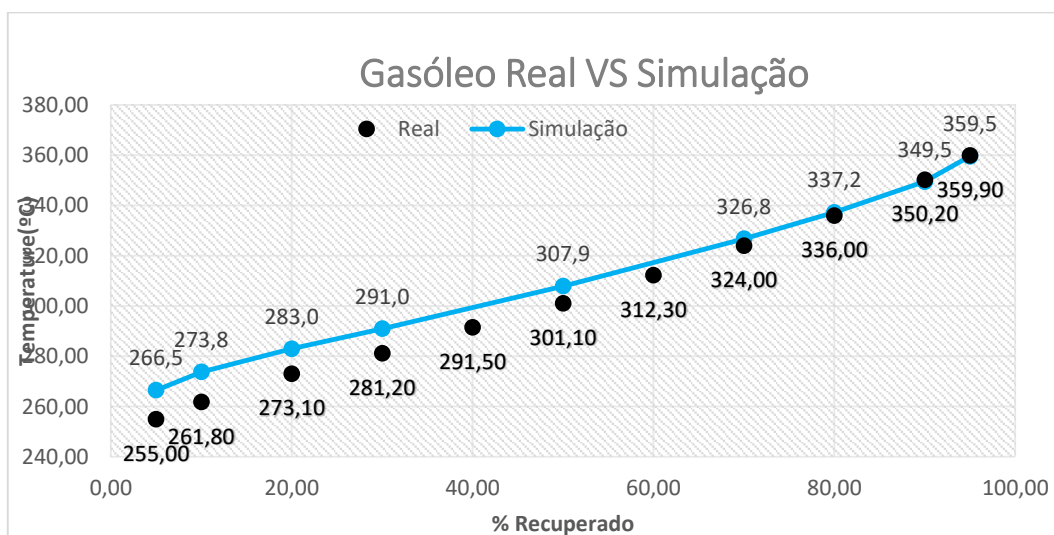


Figura 4.16 - Gasóleo Real VS Simulação 16/10/2018

4.1.1.5 UCO Real VS Simulação

No dia 25 de setembro e no dia 16 de outubro não houve medições do UCO por isso não foi possível efetuar a comparação, ainda assim, é de notar a enorme diferença entre valores contendo deltas de temperatura de quase 100 °C.

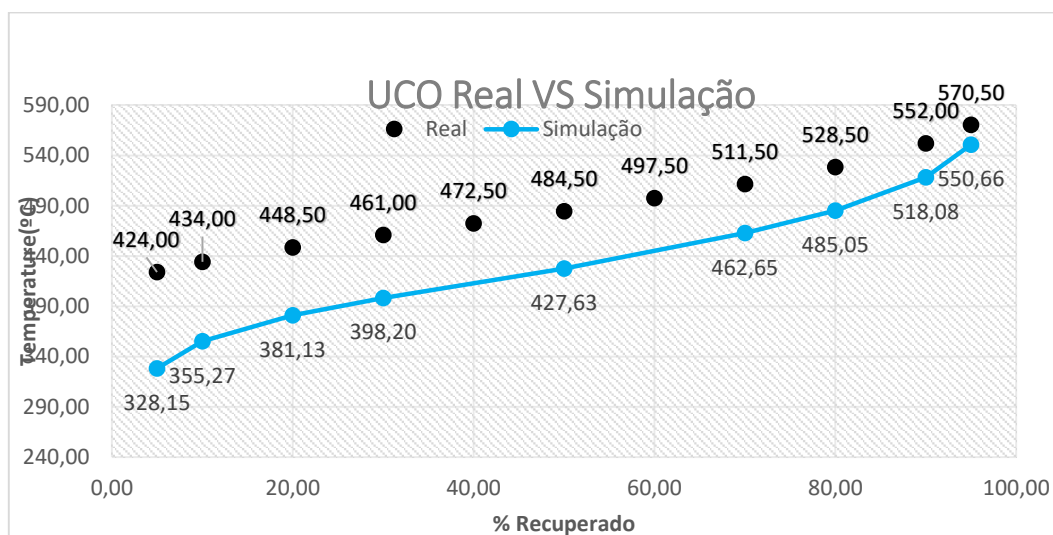


Figura 4.17 - UCO Real VS Simulação 02/10/2018

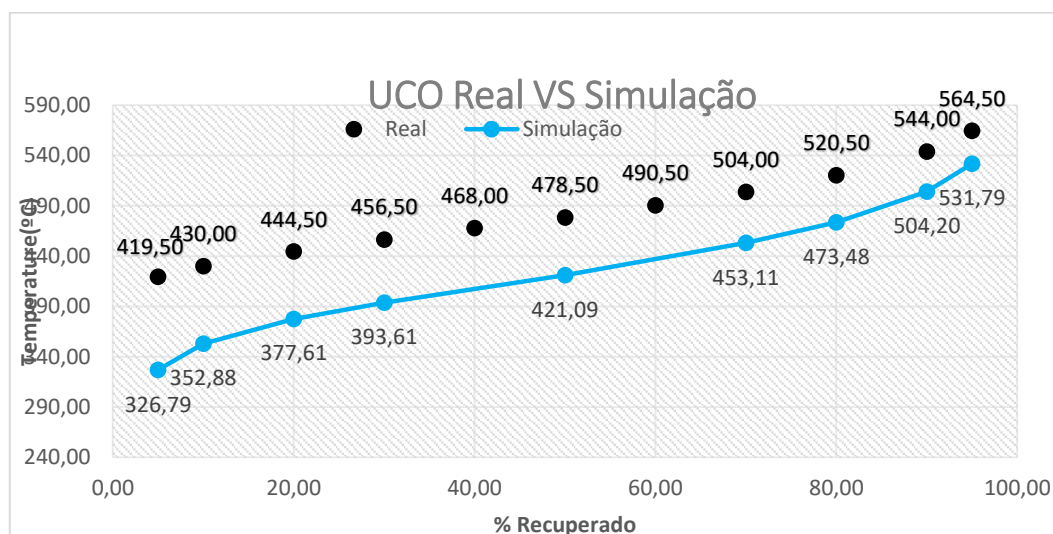


Figura 4.18 - UCO Real VS Simulação 09/10/2018

4.1.1.6 Hidrogénio Real VS Simulação

Relativamente aos outros produtos como hidrogénio, fuel gás, propano e butano que saem todos em forma de gás, as análises semanais que existem demonstram a distribuição dos componentes em percentagem volúmica. A simulação contém a distribuição molar, que foi passada posteriormente para % volúmica e comparada com a real.

Os valores do hidrogénio reais e da simulação do encontram-se abaixo, relativamente aos valores reais de fuel gás não estavam disponíveis por isso não se efetuou comparação. Os valores da corrente de hidrogénio mostram uma similaridade com os valores das análises efetuadas à unidade por isso

conclui-se que neste caso existe bastante proximidade apesar de não ser análise às curvas de destilação.

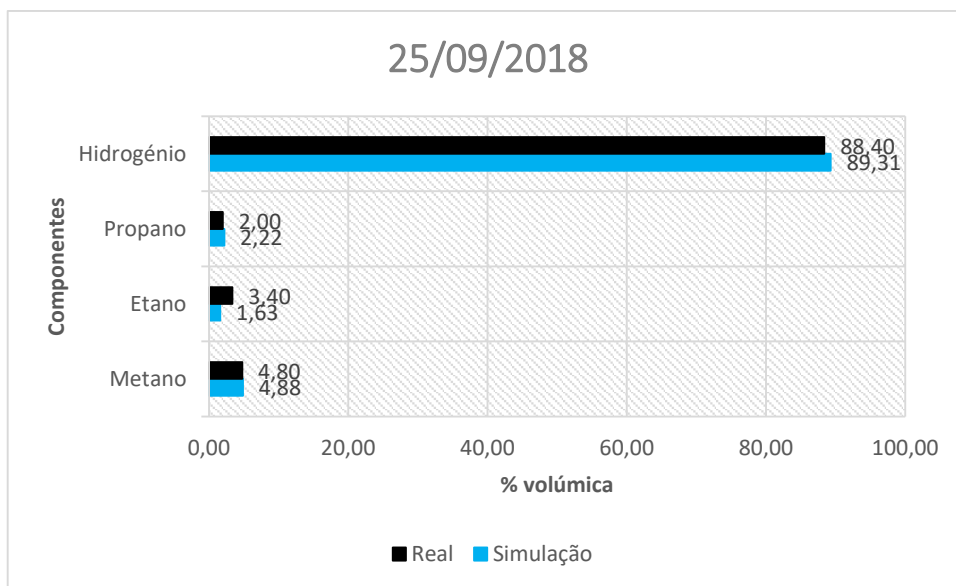


Figura 4.19 - Hidrogénio Real VS Simulação 25/09/2018

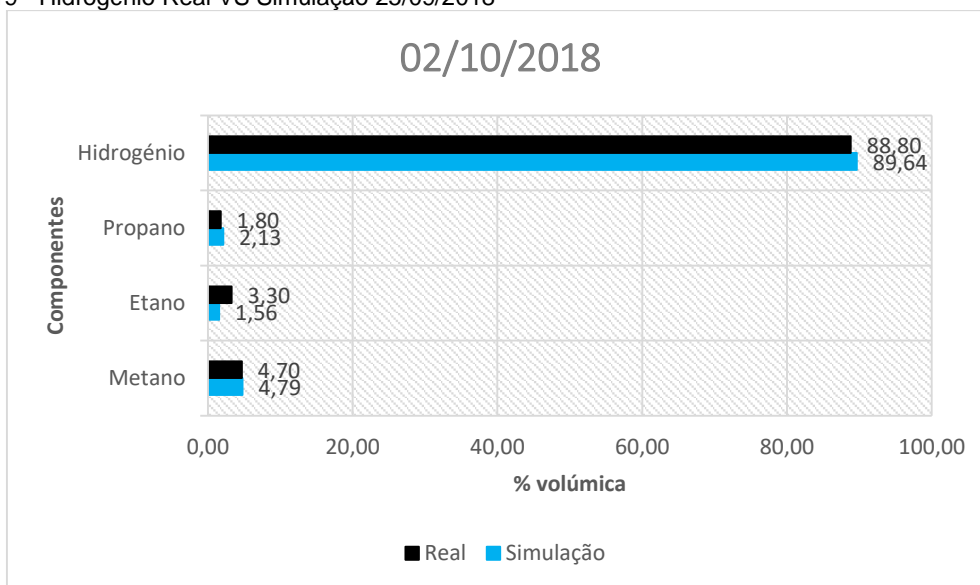


Figura 4.20 - Hidrogénio Real VS Simulação 02/10/2018

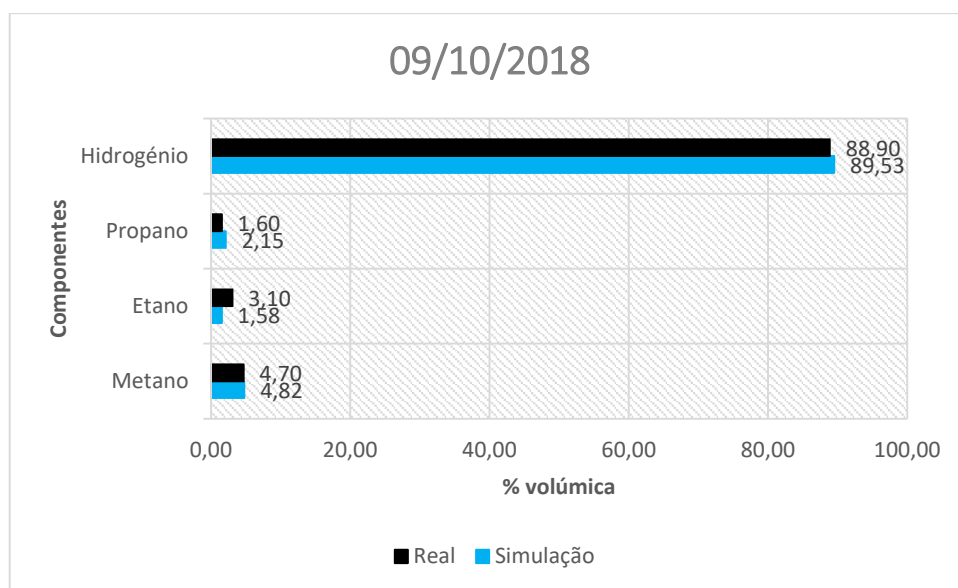


Figura 4.21 - Hidrogénio Real VS Simulação 09/10/2018

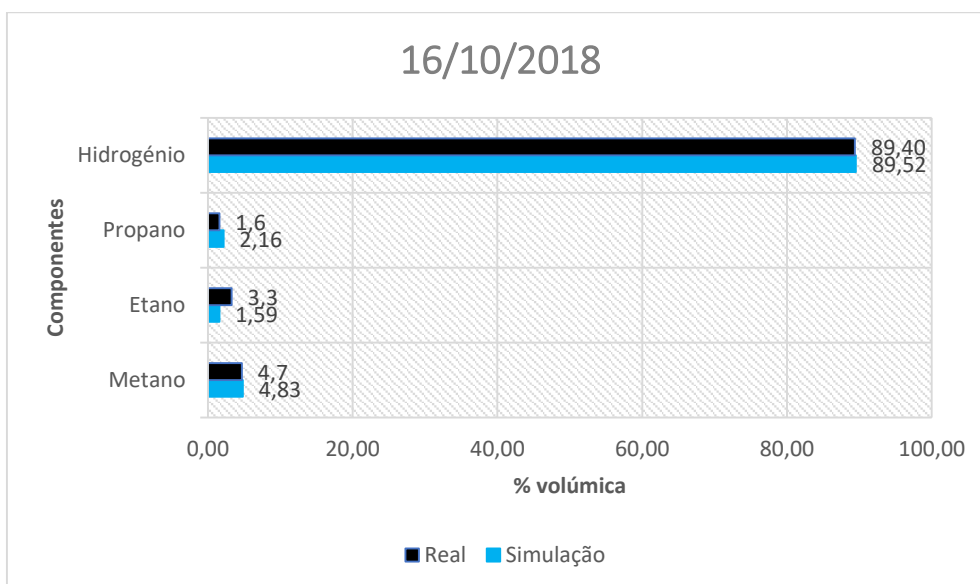


Figura 4.22 - Hidrogénio Real VS Simulação 16/10/2018

4.1.1.7 Propano e Butano Real VS Simulação

Relativamente ao propano e butano encontra-se a tabela 4.1 com os valores.

Tabela 4.1 – Tabela Comparativa dos valores simulados com os reais

		Real			
Propano-Composição	Simulação	25/09	02/10	09/10	16/10
Propano	99.951	99.31	99.290	99.37	99.4
Etano	0.049	0.27	0.28	0.22	0.21
Butano-Composição	Simulação	25/09	02/10	09/10	16/10
Butano	99.99	98.72	99.81	99.86	99.61
Pentano	0.01	0.58	0.03	0.07	0.07

Na simulação ambas as correntes só contêm compostos que estão indicados nas tabelas, contrariamente à realidade onde existem quantidades residuais de diferentes compostos. Mas por serem residuais não se consideraram importantes, o que tem efeito nesta análise pois não se poderá fazer uma análise coerente visto que na realidade surgem diferentes compostos nos produtos.

4.1.2 Análise aos rendimentos com o Balanço Diário

A comparação de rendimentos neste capítulo foi feita com os valores calculados pelo balanço diário efetuado todos os dias do departamento de processamento de dados.

As unidades desta comparação é % massa por dia, neste caso tonelada por dia, a comparação com o balanço diário, que se encontra imediatamente abaixo.

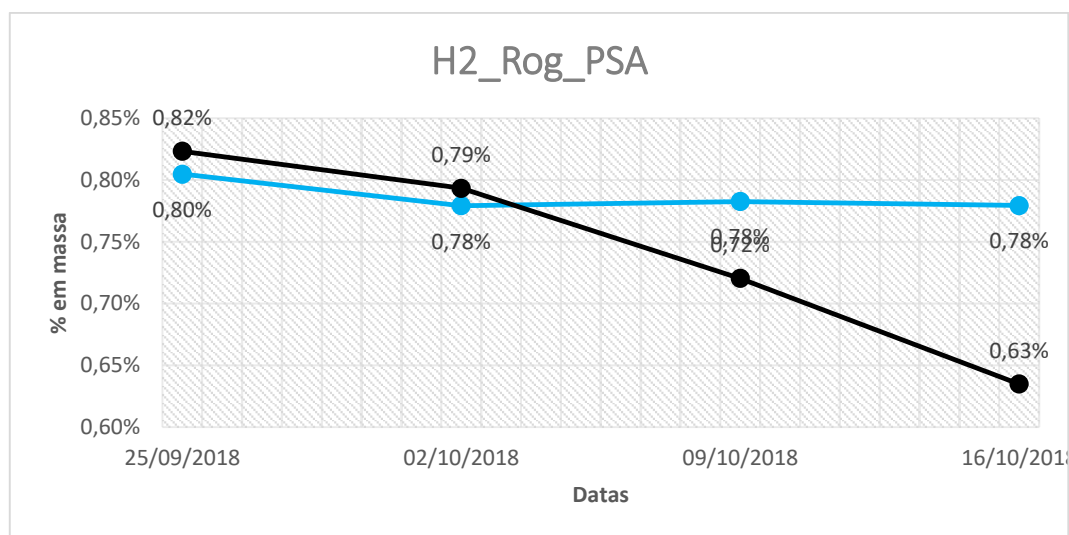


Figura 4.23 - Rendimentos do Hidrogénio Real VS Simulação (BD)

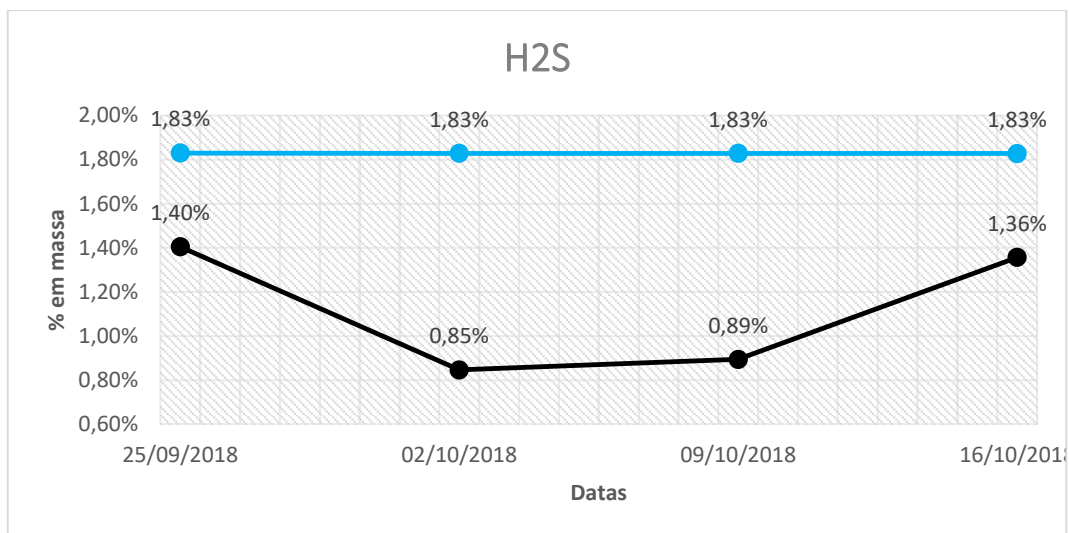


Figura 4.24 - Rendimentos do H2S Real VS Simulação (BD)

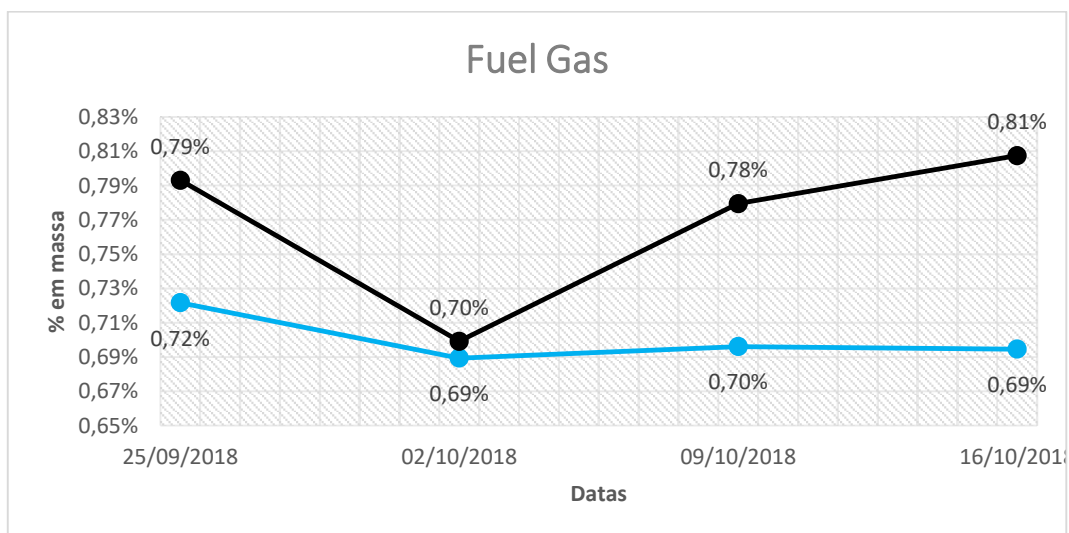


Figura 4.25 - Rendimentos do Fuel Gás Real VS Simulação (BD)

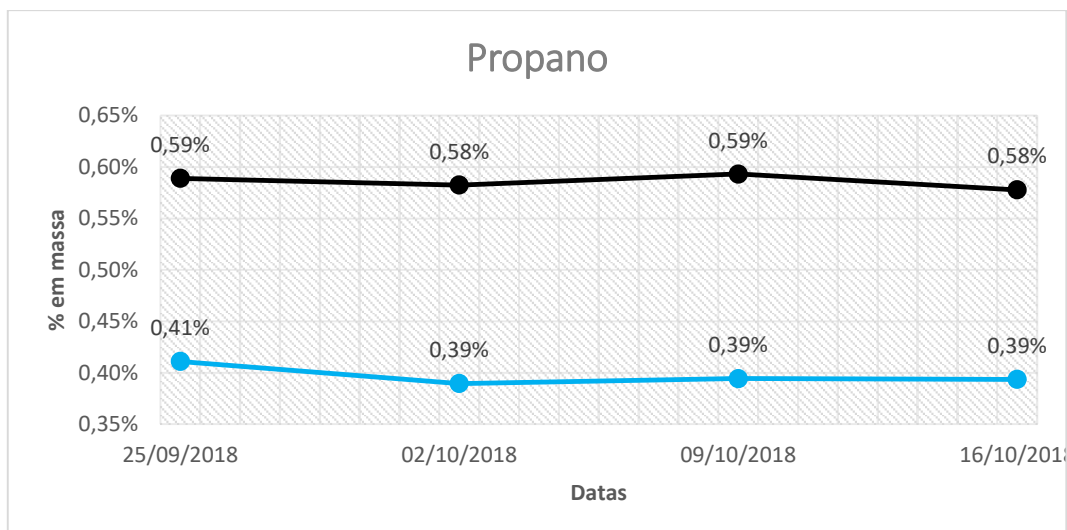


Figura 4.26 - Rendimentos do Propano Real VS Simulação (BD).

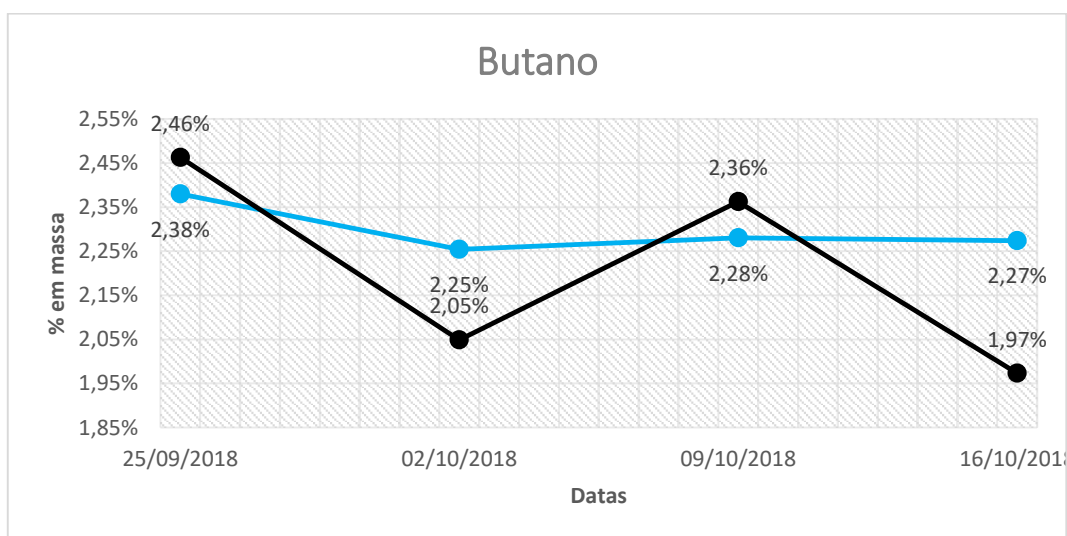


Figura 4.27 - Rendimentos do Butano Real VS Simulação (BD).

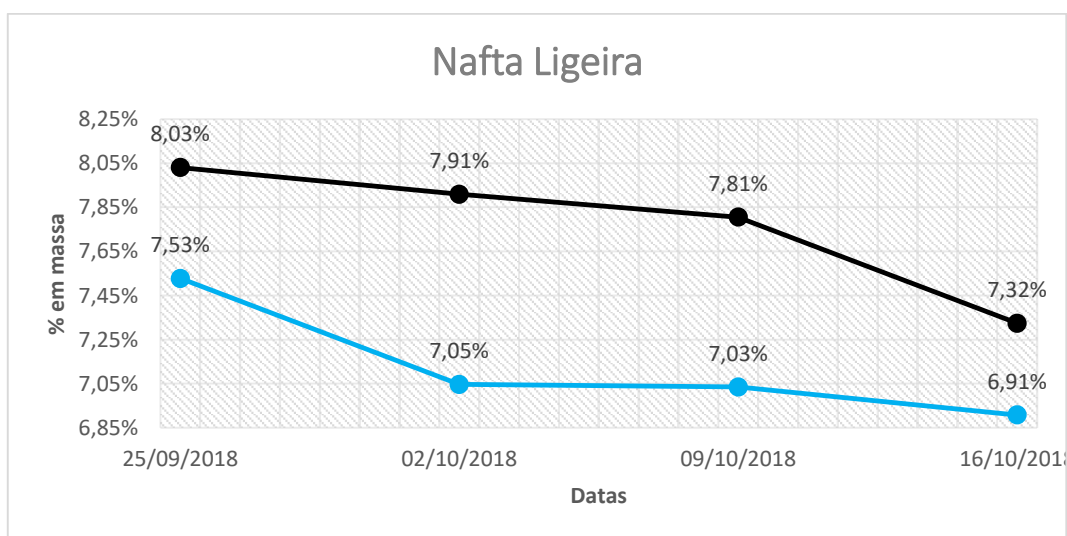


Figura 4.28 - Rendimentos da Nafta Ligeira Real VS Simulação (BD).

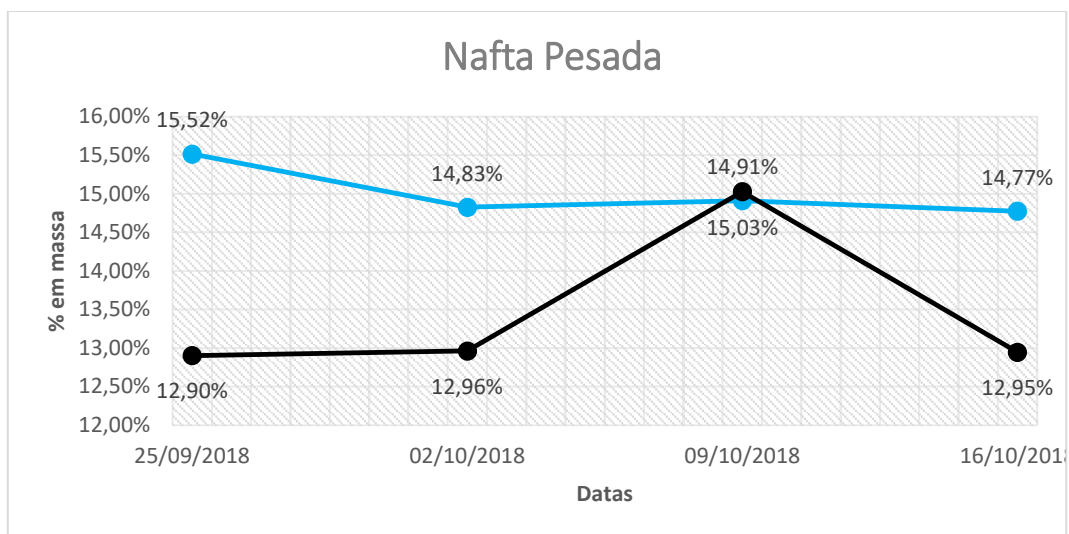


Figura 4.29 - Rendimentos da Nafta Pesada Real VS Simulação (BD).

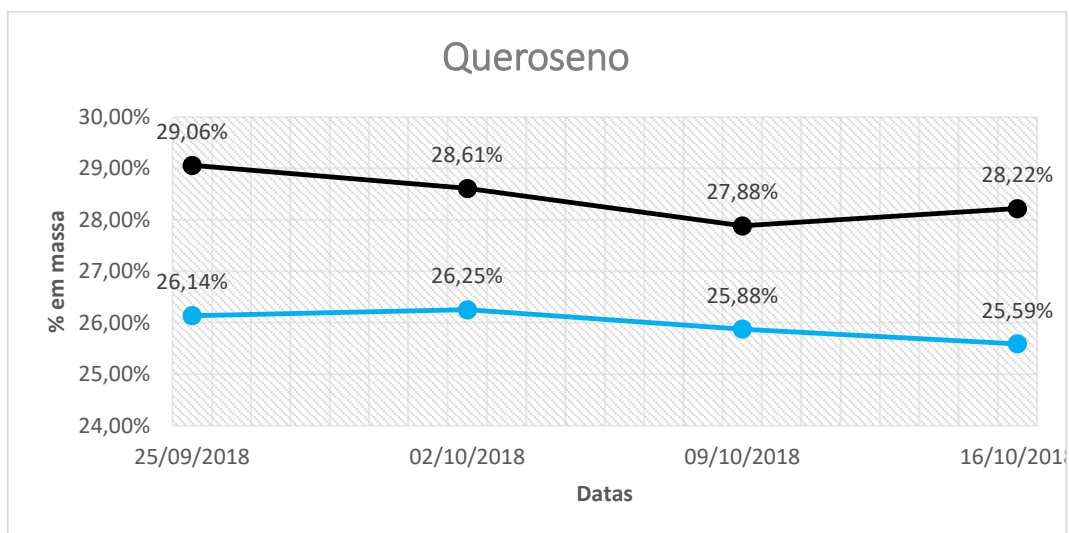


Figura 4.30 - Rendimentos do Queroseno Real VS Simulação (BD).

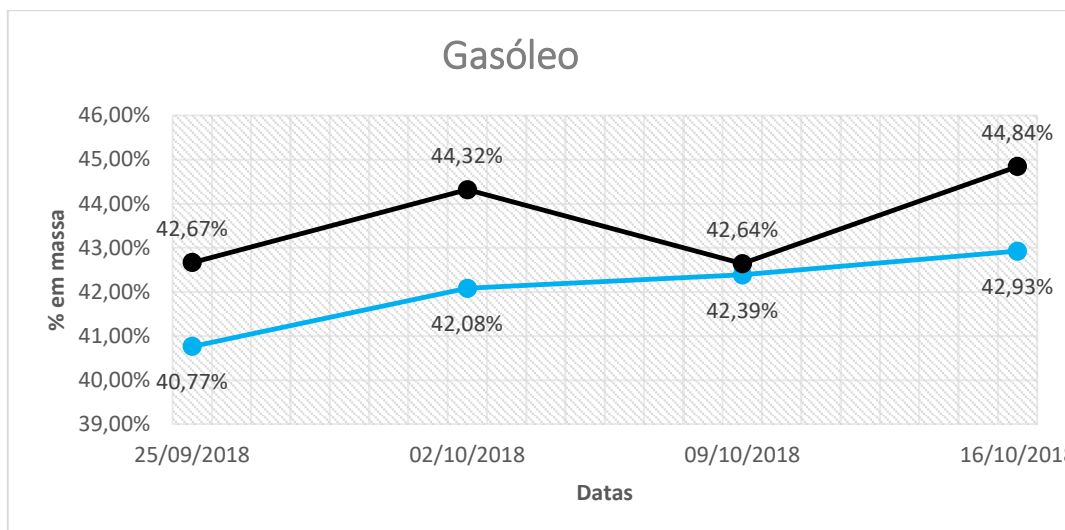


Figura 4.31 - Rendimentos do Gasóleo Real VS Simulação (BD).

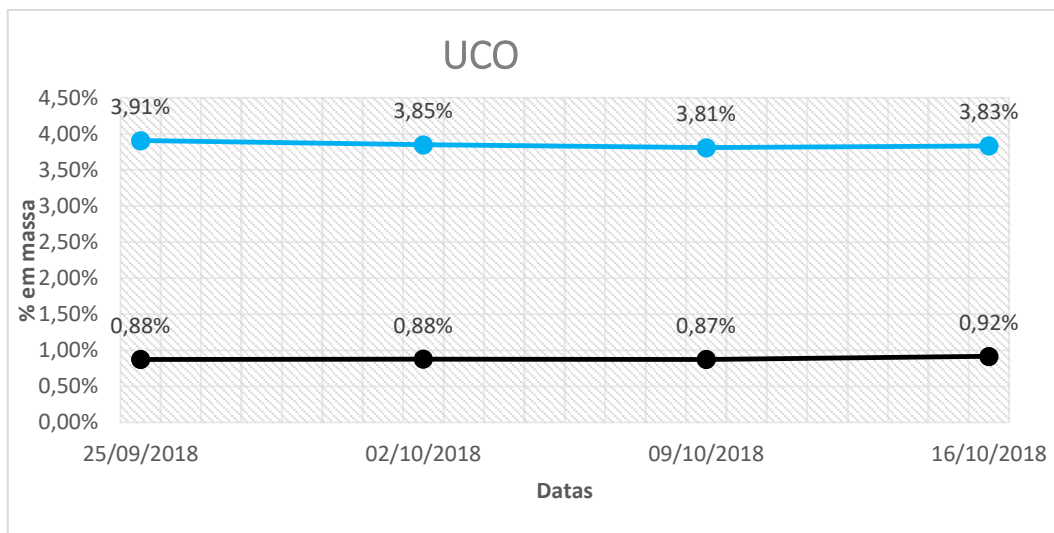


Figura 4.32 - Rendimentos do UCO Real VS Simulação (BD).

Com a presente análise verifica-se que existem desvios significativos nos rendimentos particularmente no UCO indicando desta forma que o modelo não está próximo da realidade.

É de realçar que o facto de se ter elaborado uma análise aos valores em tonelada por dia contrariamente à simulação, em que, os valores são de um determinado momento contribuiu já à partida para uma pequena incorreção.

4.1.3 Análise aos rendimentos com as medições dos caudalímetros

Na análise anterior teve-se em conta o balanço diário para as respetivas comparações, no caso que se segue utilizou-se os valores medidos pelos caudalímetros mássicos.

Estes caudalímetros estão estrategicamente colocados com o objetivo de conseguir medir e controlar todos os processos, e por isso em regra geral medem pressão, temperatura e caudal seja em forma mássica ou volúmica.

Apesar de se ter utilizado diferentes valores reais (Balanço diário e caudalímetros) para a comparação, à partida será mais correto utilizar os valores medidos pelos caudalímetros pois estas medições são efetuadas no momento e para o caso em questão estavam a utilizar-se os valores das amostras semanais que são retiradas todas as manhãs às 7 horas.

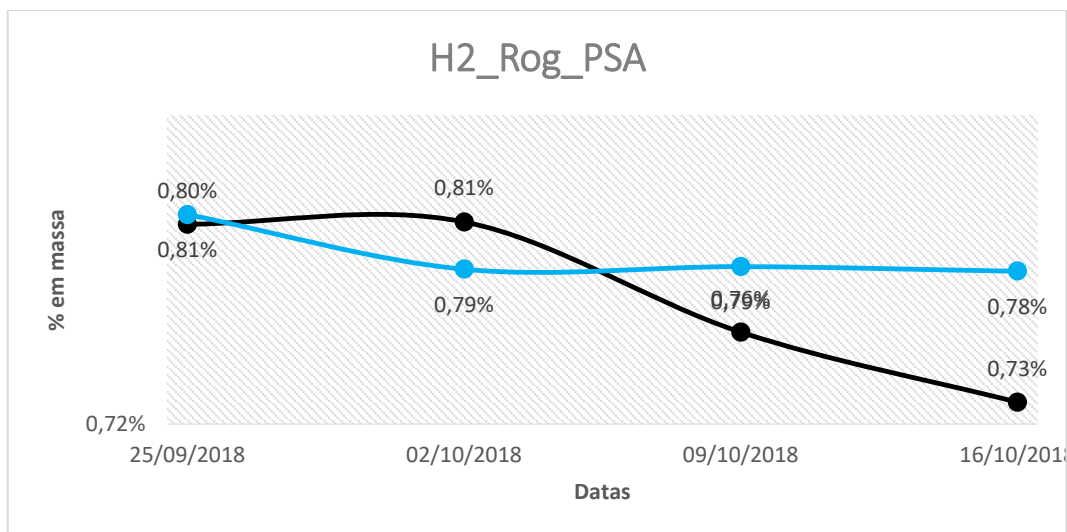


Figura 4.33 - Rendimentos do Hidrogénio Real VS Simulação (Caudalímetros).

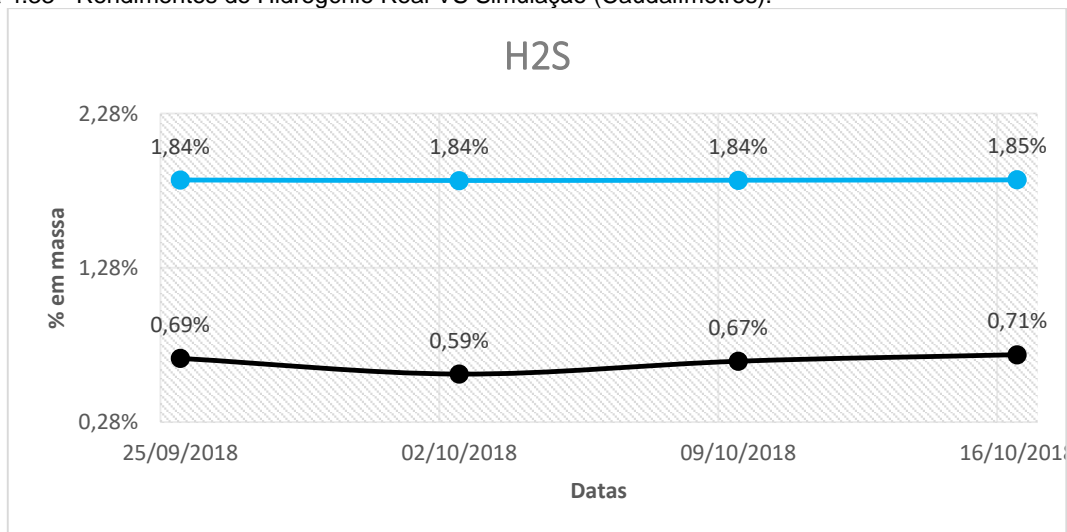


Figura 4.34 - Rendimentos do H2S Real VS Simulação (Caudalímetros)

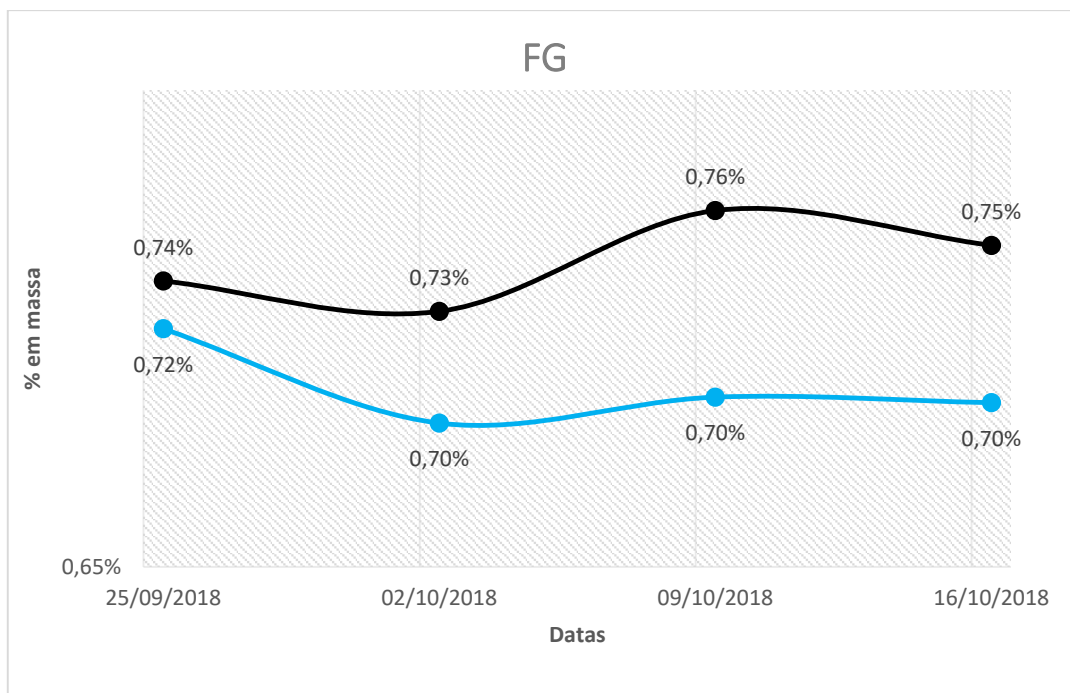


Figura 4.35 - Rendimentos do Fuel Gás Real VS Simulação (Caudalímetros)

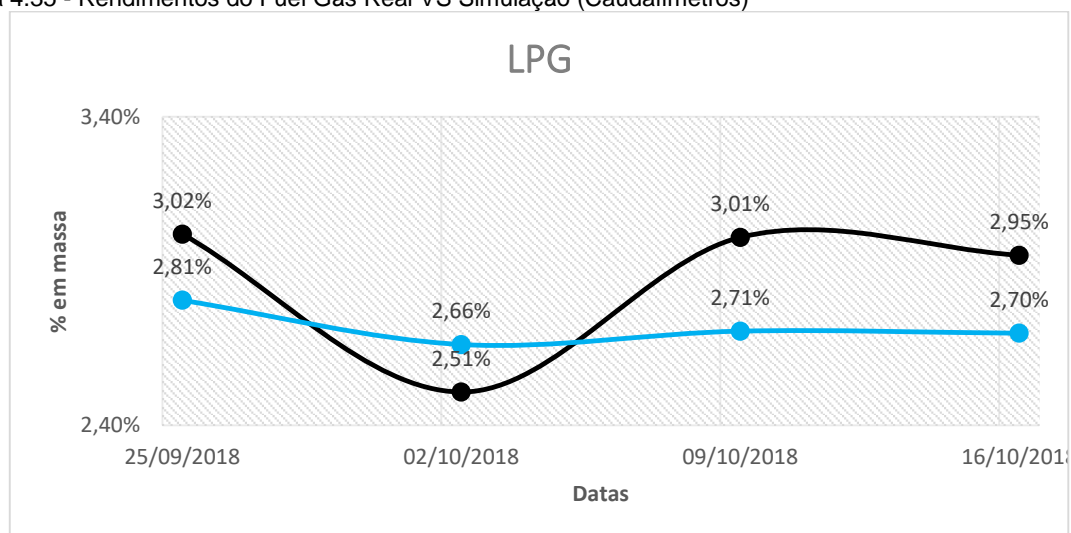


Figura 4.36 - Soma dos rendimentos do propano e butano VS Simulação (Caudalímetros)

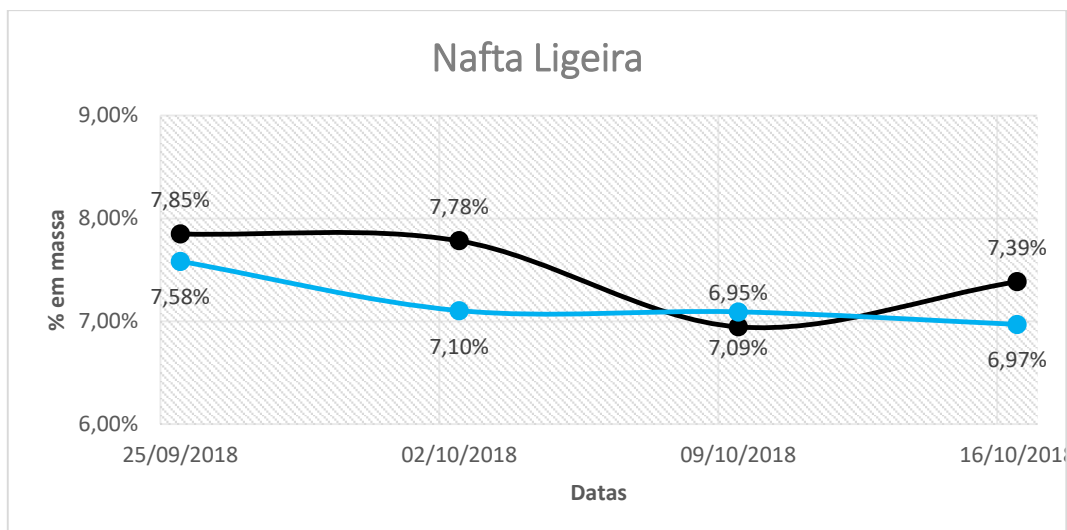


Figura 4.37 - Rendimentos da Nafta Ligeira Real VS Simulação (Caudalímetros).

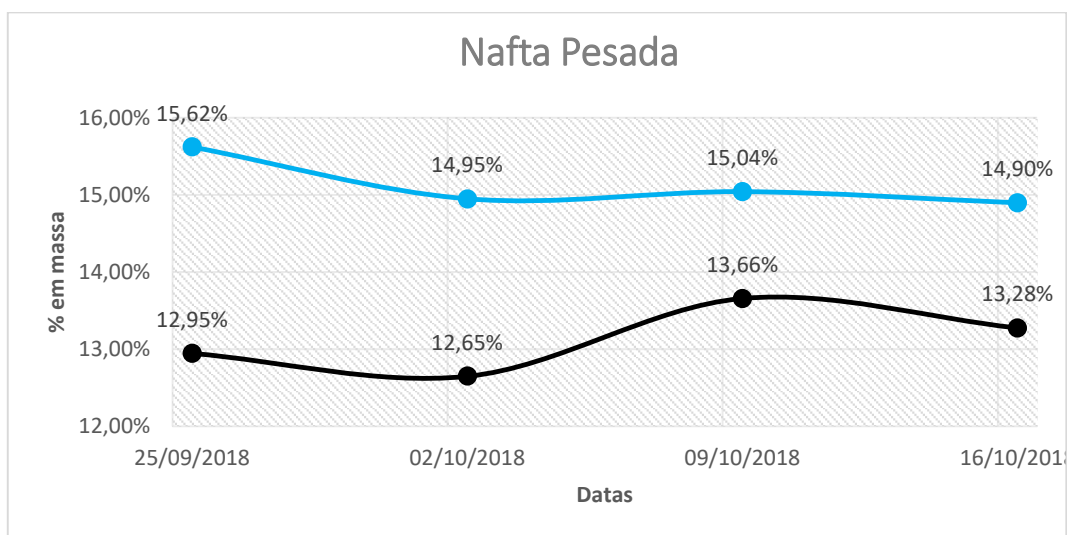


Figura 4.38 - Rendimentos da Nafta Pesada Real VS Simulação (Caudalímetros).

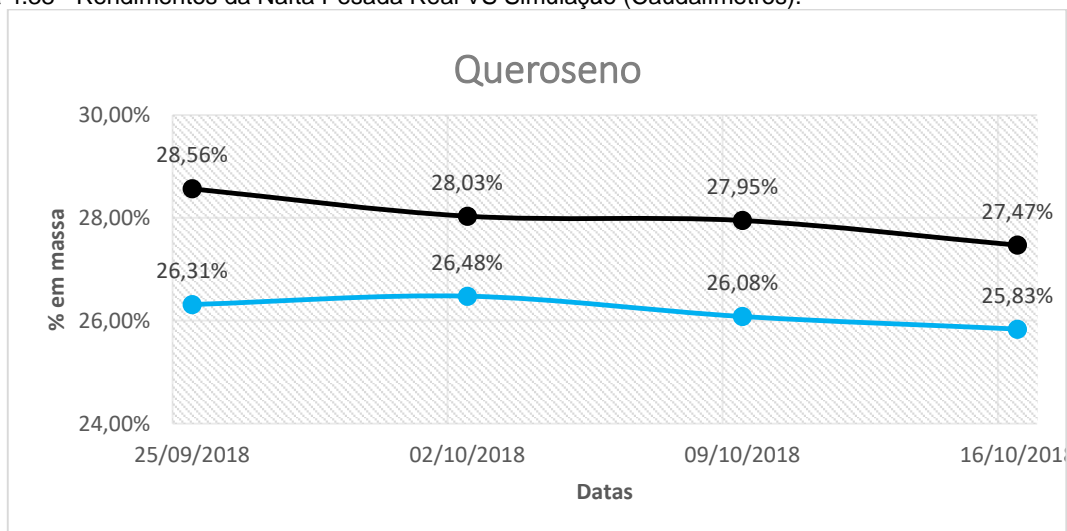


Figura 4.39 - Rendimentos do Queroseno Real VS Simulação (Caudalímetros).

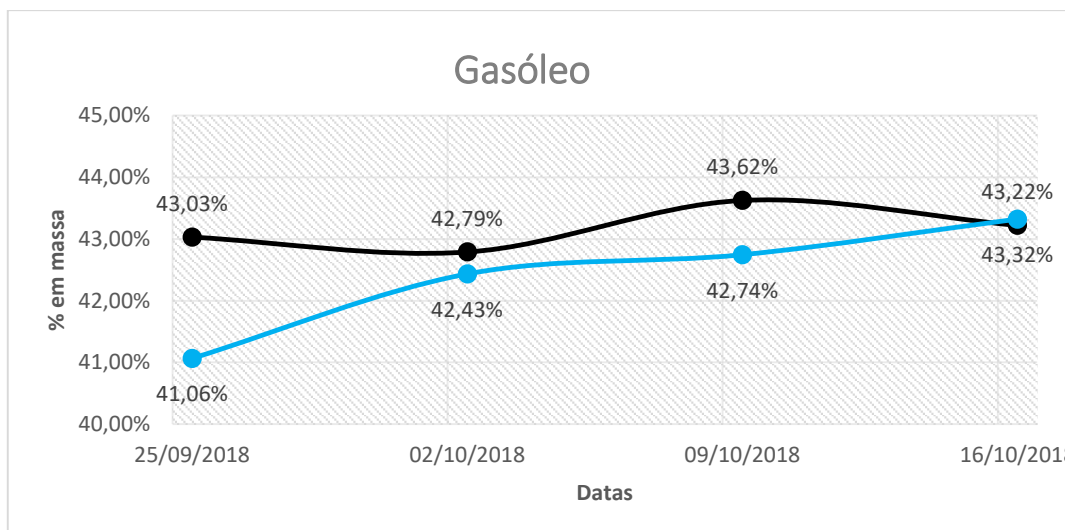


Figura 4.40 - Rendimentos do Gasóleo Real VS Simulação (Caudalímetros)

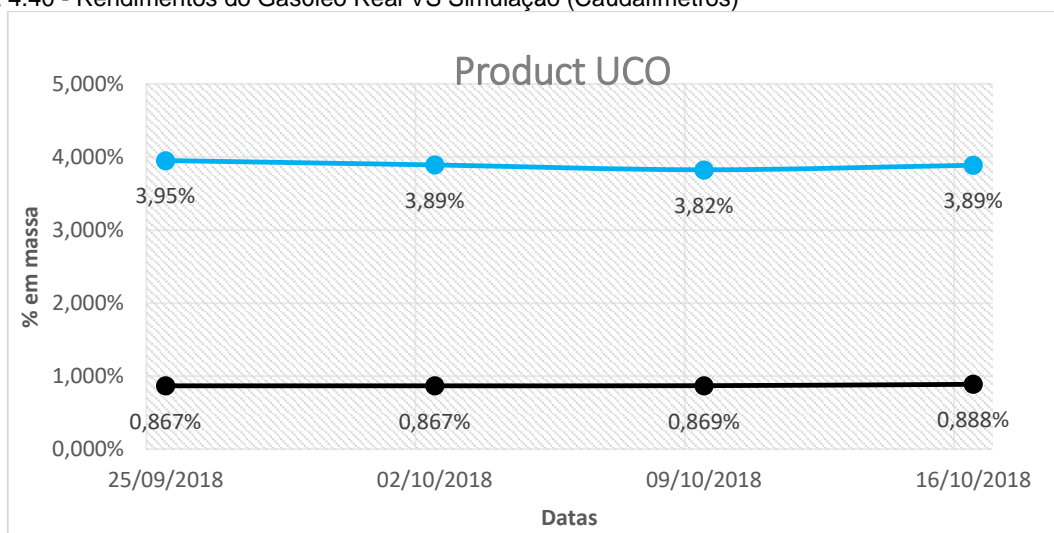


Figura 4.41 - Rendimentos do UCO Real VS Simulação (Caudalímetros)

Também nesta análise detetaram-se desvios significativos. assim sendo considerou-se que a fase seguinte seria analisar a possibilidade de ajustar os parâmetros e dados do HC com o objetivo de aproximar estes pontos.

4.1.4 Inclusão de novos dados

Como se mostra na figura 3.7 da secção 3.1.2, a conversão total estava em 95% e por isso aumentou-se para 96%, desta forma fizeram-se diversos ensaios aumentando sempre a conversão, os mesmos encontram-se na tabela 4.2. Ao longo desta fase surgiram diversos erros que foram sempre removidos através de alguma pequena alteração de temperatura do reator ou temperatura do reciclo sempre aproximadas das reais.

Tabela 4.2 Resultados do UCO após aumento da conversão total

Conversão Total <i>Hydrocracker</i>		UCO (ton./hr)
95%		10.54
96%		8.70
97%		6.14
98%		3.17
99%		0.76
99.5%		0.52

No decorrer do tempo verificou-se ao mesmo tempo as quantidades dos outros produtos, concluídos os ensaios verificou-se que nos produtos pesados tais como as naftas e o gasóleo a produção aumentava com a conversão. Em relação ao queroseno e ao UCO tinha o efeito contrário a produção diminuía. Na tabela 4.3 encontram-se os valores onde se confirma estas relações.

Tabela 4.3 Resultados dos produtos pesados após aumento da conversão total

	Real	Simulação			
(ton/hr)		95%	96%	98%	99%
Nafta Ligeira	21.78	19.03	19.82	21.59	22.56
Nafta Pesada	35.92	41.11	42.35	45.11	46.58
Queroseno	79.25	72.16	72.87	74.16	74.73
Gasóleo	119.39	117.2	116.7	115.4	114.5

Relativamente aos produtos leves o LPG e o Fuel gás aumentaram ligeiramente aproximando-se dos valores reais, ao invés da quantidade de H₂ que já se encontrava idêntica à real acabou por aumentar ligeiramente. Por fim o H₂S diminui a sua quantidade apesar de não ter sido uma diminuição suficiente para se conseguir aproximar dos valores.

De forma a conseguir a conversão que mais se aproximava dos valores reais escolheu-se os 98% como a conversão final.

Para efetuar a validação do modelo foi necessário comparar novamente os rendimentos reais com os da simulação, e com a tabela 4.4 concluiu-se que já se aproximavam mais dos reais apesar de ainda serem um pouco díspares.

Tabela 4.4 Comparação dos Rendimentos

	Real	Simulação	
%		Anterior	
H2	0.80%	0.81%	0.84%
H2S	0.69%	1.84%	1.84%
FG	0.74%	0.72%	0.76%
LPG	3.02%	2.81%	2.94%
Nafta Ligeira	7.85%	7.58%	8.00%
Nafta Pesada	12.95%	15.62%	16.64%
Queroseno	28.56%	26.31%	26.94%
Gasóleo	43.03%	41.06%	41.83%
UCO	0.867%	3.95%	1.15%

Nesta fase considerou-se que o modelo é adequado e representa corretamente a unidade atual, tende-se considerado o modelo validado e calibrado.

4.1.5 Dashboards

Considerado o modelo calibrado e validado iniciou-se o desenvolvimento de *dashboards* e o esquema de ligação entre operador de consola e Petro-SIM™.

A primeira *dashboard* tinha o aspeto da figura 4.42, onde do lado esquerdo canto superior da folha do excel estavam os inputs e do lado direito encontravam-se os resultados das simulações.

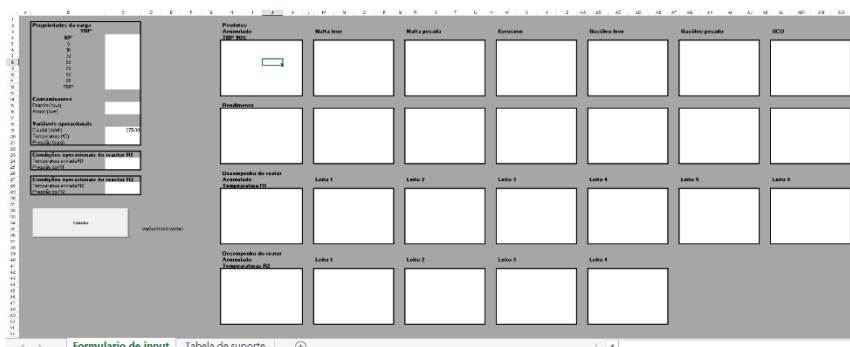


Figura 4.42-Dashboard Inicial

Apesar da abordagem inicial optou-se por definir uma nova estratégia que seria ter dois diferentes cenários que se alcançariam através de dois botões distintos como se demonstra na figura 4.43.

Para caracterizar a carga definiu-se como *input*'s os dados seguintes:

- Curva de destilação;
- Asfaltenos (%m);
- CCR (%m);
- Densidade (ton/m³);
- Azoto (%m);
- Enxofre (%m);
- Caudal Volumétrico e Mássico;
- Temperatura;

Em relação aos reatores selecionou-se os caudais de *quench* e a pressão, adicionalmente para o 1º reator selecionou-se também a temperatura.

Apesar dos parâmetros escolhidos não é necessário preencher todos os espaços em apenas uma utilização, pois pode por exemplo querer apenas verificar o impacto da temperatura e preenche o espaço da temperatura somente.

Para os valores de input efetuou-se um *link*, isto é uma ligação entre as células do Microsoft Excel e os valores do *predict input* que se localizam no *workbook* que faz integração com o Petro-SIM™ como foi explicado na secção 2.2.1 e utilizado na secção 3.1.1.

Relativamente aos dados gerados no *predict result* são então as respostas da simulação que por sua vez se encontram ligadas diretamente aos gráficos.

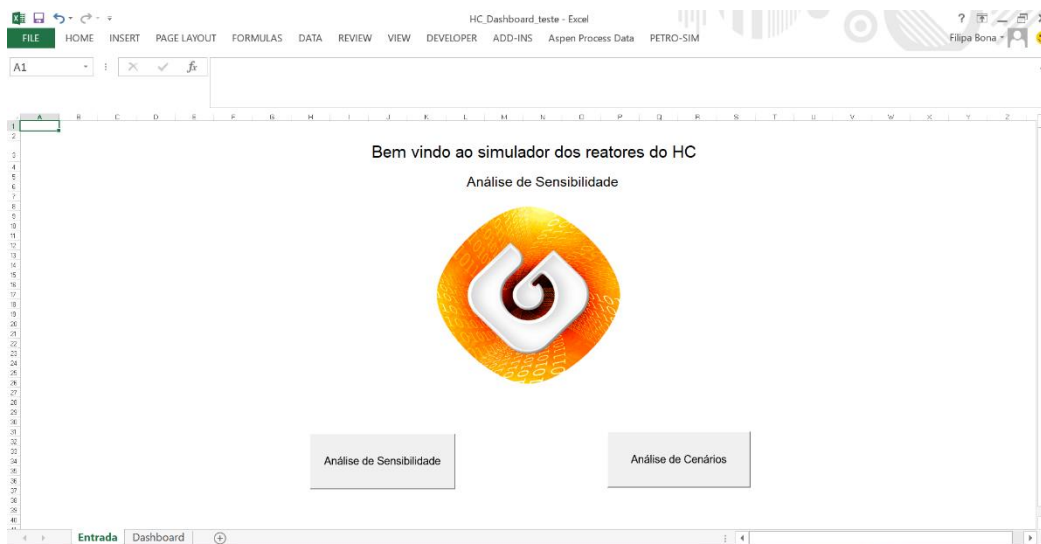


Figura 4.43 – *Dashboard*

Estes dois botões permitem a navegação entre dois ficheiros. Um dos ficheiros tinha como objetivo comparar dois cenários implementados enquanto que o outro era focado para a análise de sensibilidade.

Para ambas as análises as variáveis que pareceram mais pertinentes e com interesse para o processo estão demonstradas na *dashboard* que se apresentam nas próximas figuras entre elas encontra-se uma variável denominada WABT.

Considera-se que um reator tem um perfil de temperaturas, seja, crescente ou decrescente devido às reações que ocorrem ao longo do mesmo, no entanto, a variável WABT é essencialmente um valor de temperatura representativo de um reator. Esta variável é principalmente utilizada para indicar a atividade do catalisador, onde a desativação do mesmo começa a ocorrer desde o início do processo.

Esta relação é estabelecida, visto que, para manter a atividade do catalisador apesar da sua desativação, a temperatura de entrada é gradualmente aumentada pelos operadores para manter a conversão ao mesmo nível e o perfil de temperatura altera com o tempo, alterando por sua vez o valor de WABT [67], [68].

Relativamente às % de nafta e diesel (gasóleo) servem para ter uma perceção das curvas de destilação e do rendimento dos produtos.

O *flash point* do jet ou também denominado ponto de fulgor é a temperatura mais baixa na qual um combustível líquido produz vapores de modo a haver ignição espontânea na presença de faísca. Este valor é bastante relevante devido à segurança no armazenamento e transporte, pois indica o potencial de incêndio e explosão. Todos os combustíveis de aviação estão sujeitos a rigorosos testes e qualquer combustível que falhe nesses testes é desviado para aplicações no solo [69] [61].

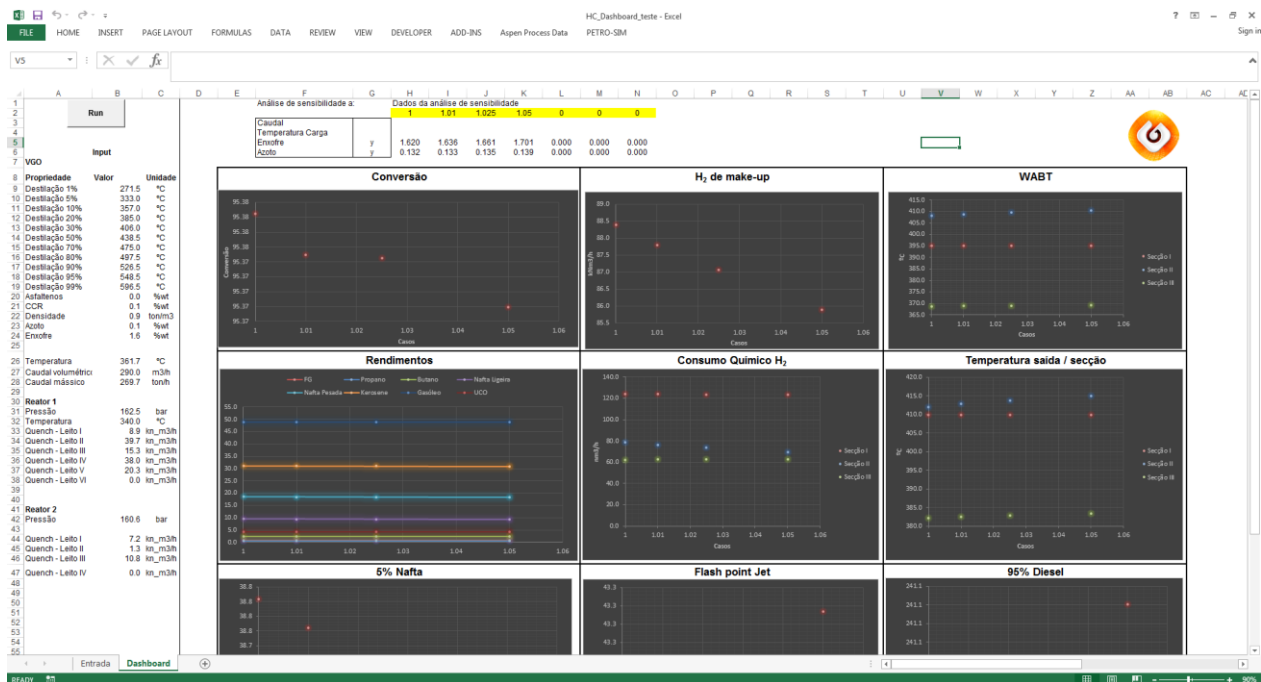


Figura 4.44 – Dashboard Análise de Sensibilidade

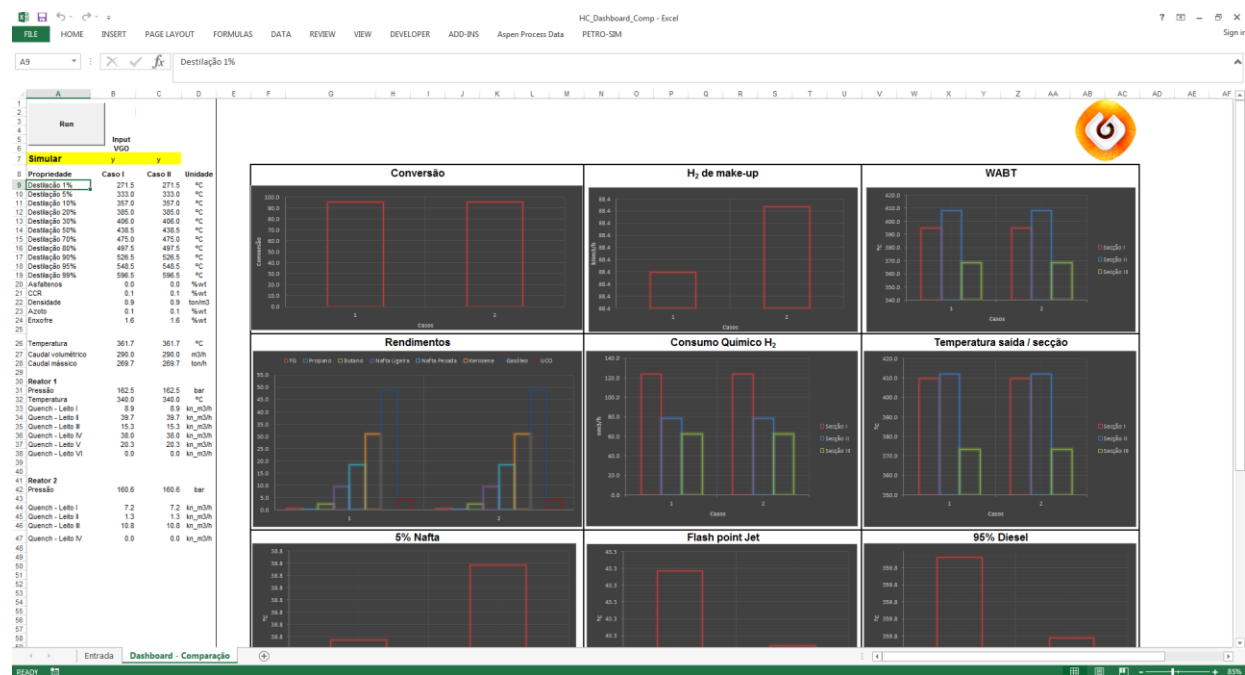


Figura 4.45 – Dashboard Análise de Cenário

4.2 Validação e Calibração do Modelo de FCC (Fluid Catalytic Cracker)

4.2.1 Calibração do FCC

Após o procedimento abordado na secção 3.3.1 iniciou-se a fase de calibração, seleccionou-se o *Calibrate* onde se encontram representados 3 pequenos separadores como se encontra na imagem 4.2.1 designados “Reconcile”, “Validate” e “Calibrate”.

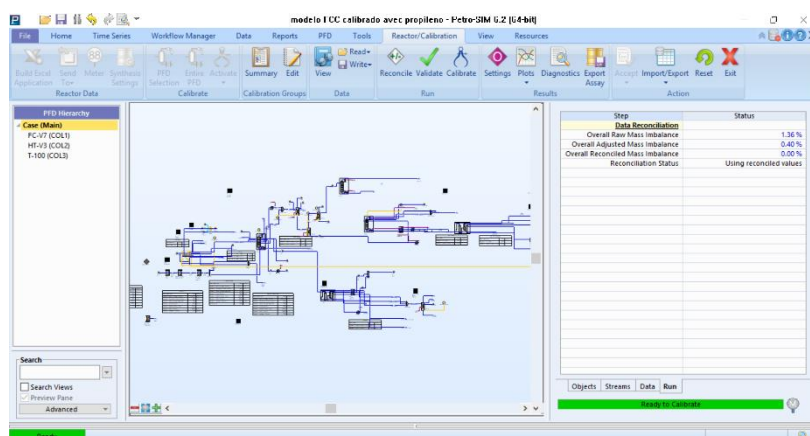


Figura 4.46-Reactor/Calibration do Petro-SIMTM

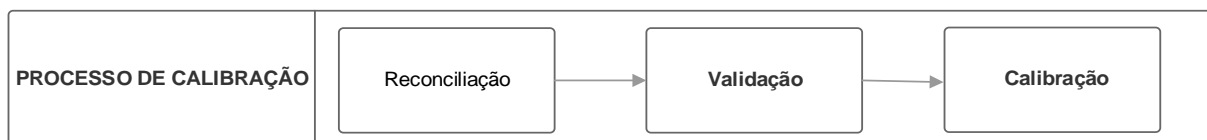


Figura 4.48-Esquema dos processos efetuados

Meter Data	Mass flow	Typical Error	Error Basis	Reconciled	Rec Error	CO by Wt	Typical
Carga FCC-Meter	265.1 tonn	2.00 %	Relative	265.9 tonn	0.32 %		1.000
CO Inerts-Meter	0.3118 toni		Estimate	0.3118 toni		100.0000 w	2.00 %
CO2 Inerts-Meter	0.7159 toni		Estimate	0.7159 toni			1.000
N2 Inerts-Meter	1.554 tonn		Estimate	1.554 tonn			1.000
NaftaVB-Meter	1.650 tonn	2.00 %	Relative	1.650 tonn	0.00 %		1.000
Off Gas-Meter	2.600 tonn	2.00 %	Relative	2.600 tonn	0.00 %	0.0000 wt %	2.00 %
Feed Total	269.3 tonn			272.8 tonn		0.0000 toni	
Butileno-Meter	27.85 tonn	2.00 %	Relative	27.84 tonn	0.03 %	0.1480 wt %	2.00 %
cok-Meter	12.84 tonn	0.0000 toni	No Error	12.84 tonn			1.000
fgas-Meter	17.62 tonn	2.00 %	Relative	17.62 tonn	0.02 %		2.00 %
Inerts-Meter	2.456 tonn	2.00 %	Relative	2.456 tonn	0.00 %	11.0149 wt	2.00 %
LCO-Meter	16.76 tonn	2.00 %	Relative	16.76 tonn	0.02 %		1.000
Nafta_Stabilizada-Meter	131.8 tonn	2.00 %	Relative	131.6 tonn	0.16 %		1.000
Propileno-Meter	16.44 tonn	2.00 %	Relative	16.44 tonn	0.02 %		2.00 %
Slurry-Meter	19.57 tonn	2.00 %	Relative	19.57 tonn	0.02 %		1.000
Swing Cut-Meter	27.61 tonn	2.00 %	Relative	27.60 tonn	0.03 %		1.000
Product Total	273.0 tonn			272.8 tonn		0.3118 toni	
Overall Imbalance	-3.676 tonr			-3.600e-00		-0.3118 tor	
Overall Imbalance %	-1.36 %			0.00 %		-200.00 %	
Adjusted Imbalance	-1.095 tonr					0.0000 toni	
Adjusted Imbalance %	-0.40 %					0.00 %	

Figura 4.47-Seção do Reconcile-Meter Data

Os valores que surgem são os inseridos no Meter como se confirma na imagem 4.2.4, surgem também valores já reconciliados com as respectivas tolerâncias. A coluna “Rec Error” mostra a diferença entre o valor e o seu reconciliado respetivo.

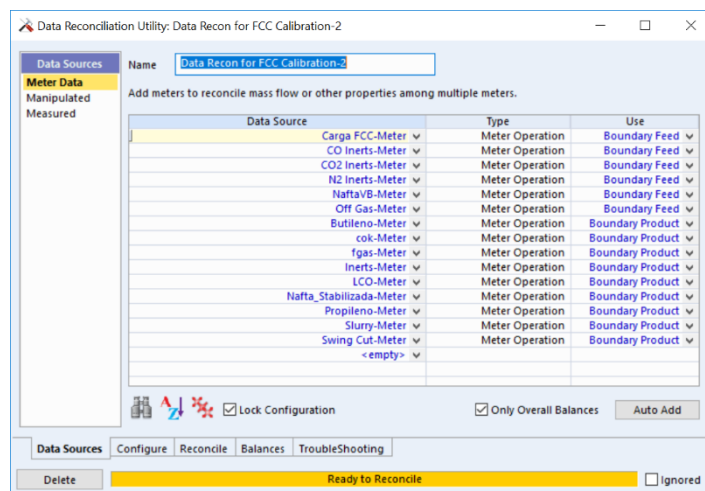


Figura 4.49-Seção dos dados utilizados no *Reconcile*

A imagem 4.47 não é a representativa do processo, ou seja, de quando foi efetuada a primeira reconciliação. Pois na primeira reconciliação existiam valores de Rec Error mais elevados, no entanto nunca com cor vermelha. O Petro-SIM™ considera vermelho quando $\text{Rec Error} > \text{Error Level} * \text{Typical Error}$, ou seja, no fundo os valores nestes casos apresentam-se bastante distantes dos reconciliados.

Após se clicar no “Reconcile!” o Petro-SIM™ altera assim alguns valores com o objetivo de fechar o balanço de massa.

Os valores finais são os que se encontram na figura 4.50.

Mass Flow	Screened	Typical Error	Error Basis	Reconciled	Rec Error	Screened	Typical Error
Carga FCC-Meter	265.1 tonn	2.00 %	Relative	265.9 tonn	0.32 %		1.000
CO Inerts-Meter	0.3118 tonn		Estimate	0.3118 tonn		100.0000 w	2.00 %
CO2 Inerts-Meter	0.7159 tonn		Estimate	0.7159 tonn			1.000
N2 Inerts-Meter	1.554 tonn		Estimate	1.554 tonn			1.000
NaftaV-B-Meter	1.650 tonn	2.00 %	Relative	1.650 tonn	0.00 %		1.000
Off Gas-Meter	2.600 tonn	2.00 %	Relative	2.600 tonn	0.00 %	0.0000 wt %	2.00 %
Feed Total	269.3 tonn			272.8 tonn		0.0000 tonn	
Butileno-Meter	27.85 tonn	2.00 %	Relative	27.84 tonn	0.03 %	0.1490 wt %	2.00 %
cok-Meter	12.84 tonn	0.0000 tonn	No Error	12.84 tonn			1.000
fgas-Meter	17.62 tonn	2.00 %	Relative	17.62 tonn	0.02 %		2.00 %
Inerts-Meter	2.456 tonn	2.00 %	Relative	2.456 tonn	0.00 %	11.0149 wt	2.00 %
LCO-Meter	16.76 tonn	2.00 %	Relative	16.76 tonn	0.02 %		1.000
Nafta_Stabilizada-Meter	131.8 tonn	2.00 %	Relative	131.6 tonn	0.16 %		1.000
Propileno-Meter	16.44 tonn	2.00 %	Relative	16.44 tonn	0.02 %		2.00 %
Slurry-Meter	19.57 tonn	2.00 %	Relative	19.57 tonn	0.02 %		1.000
Swing Cut-Meter	27.61 tonn	2.00 %	Relative	27.60 tonn	0.02 %		1.000
Product Total	273.4 tonn			272.8 tonn		0.3118 tonn	
Overall Imbalance	-3.676 tonn			-3.600e-00		-0.3118 ton	
Overall Imbalance %	-1.36 %			0.00 %		-200.00 %	
Adjusted Imbalance	-1.095 tonn					0.0000 tonn	
Adjusted Imbalance %	-0.40 %					0.00 %	

Figura 4.50 – Resultados do *Reconcile*

Para verificar somente os dados de entrada antes de efetuar a calibração completa prosseguiu-se à validação. A validação é executada nas etapas de síntese de modo a validar os dados das mesmas sem fazer calibração. Este passo foi bem-sucedido e por isso passou-se à fase de calibração.

[illegible]

Figura 4.51 - Resultados da Validação

A calibração basicamente sintetiza a carga e calibra os reatores, enquanto o faz mostra no Petro-SIMTM os passos e a informação do estado para mostrar o progresso como se mostra na figura 4.52. Nesta mesma figura verifica-se o sucesso da calibração, houve unidades que não foram escolhidas para efetuar a calibração pois são algumas das unidades tais como a dessulfuração de gasóleo de vácuo que se encontram depois das correntes dos produtos que estamos a analisar.

Step	Status
<u>Data Reconciliation</u>	
Overall Raw Mass Imbalanc	1.36 %
Overall Adjusted Mass Imb	0.40 %
Overall Reconciled Mass Ir	0.00 %
Reconciliation Status	Using reconciled values
<u>Synthesize and Validate</u>	
Synthesize: Carga FCC+	Success
Synthesize: FCC-Calibratio	Success
Synthesize: NaftaVB+	Success
Synthesize: Off Gas+	Success
FCC Validation	Warning Status
<u>Calibrate</u>	
FCC	Success
Resynthesizing: NaftaVB+	Note
<u>Synthesize and Validate</u>	
Synthesize: NaftaVB+	Success
<u>Calibrate</u>	
FC-V7	Success
HT-V3	Skipped
HG_split	Skipped
GC-V8	Success
GC-V9	Success
GC-V11	Success

Figura 4.52-Resultados da Calibração

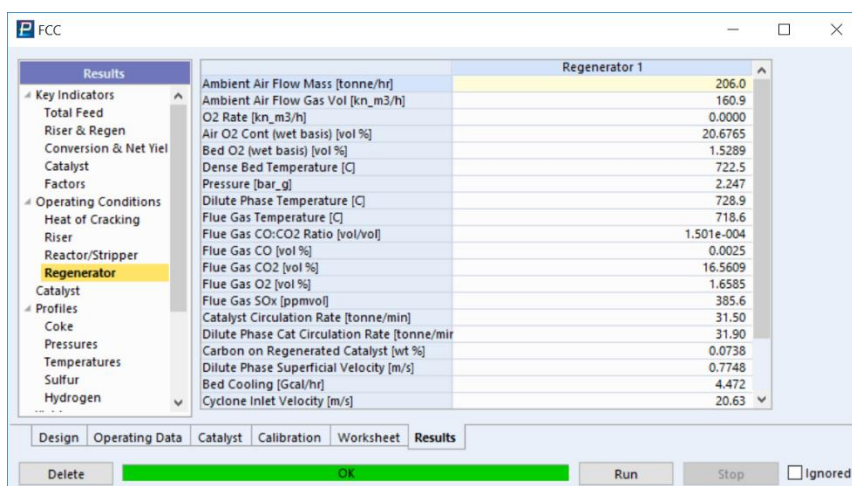
Concluída a fase de calibração e validação do modelo de FCC foi necessário acrescentar ao modelo o Catalyst Cooler que foi adquirido pela Galp em outubro de 2018.

4.2.2Catalyst Cooler

Após a escolha da data reuniu-se novamente todos os dados referidos na fase de validação, adicionalmente nesta fase foi necessário calcular os valores de vapor gerado de forma a verificar o comportamento da simulação.

O vapor que se obteve neste dia foi de 8.217 ton/hr que corresponde aproximadamente a 4.6 Gcal/hr.

Após se seguir a metodologia apresentada na secção 3.3.4 os valores de energia apresentavam sendo de 4.472 Gcal/hr o que se traduz numa quantidade de 7.989 ton / hr.



FCC		Regenerator 1
Key Indicators	Ambient Air Flow Mass [tonne/hr]	206.0
Total Feed	Ambient Air Flow Gas Vol [kn_m3/h]	160.9
Riser & Regen	O2 Rate [kn_m3/h]	0.0000
Conversion & Net Yiel	Air O2 Cont [wet basis] [vol %]	20.6765
Catalyst	Bed O2 [wet basis] [vol %]	1.5289
Factors	Dense Bed Temperature [C]	722.5
Operating Conditions	Pressure [bar_g]	2.247
Heat of Cracking	Dilute Phase Temperature [C]	728.9
Riser	Flue Gas Temperature [C]	718.6
Reactor/Stripper	Flue Gas CO:CO2 Ratio [vol/vol]	1.501e-004
Regenerator	Flue Gas CO [vol %]	0.0025
Catalyst	Flue Gas CO2 [vol %]	16.5609
Profiles	Flue Gas O2 [vol %]	1.6585
Coke	Flue Gas SOx [ppmv]	385.6
Pressures	Catalyst Circulation Rate [tonne/min]	31.50
Temperatures	Dilute Phase Cat Circulation Rate [tonne/min]	31.90
Sulfur	Carbon on Regenerated Catalyst [wt %]	0.0738
Hydrogen	Dilute Phase Superficial Velocity [m/s]	0.7748
	Bed Cooling [Gcal/hr]	4.472
	Cyclone Inlet Velocity [m/s]	20.63

Figura 4.53 – Valores de Energia: *Bed Cooling Water*

Este valor mostra uma pequena diferença do da realidade e por isso ainda se fez algumas investidas e tentou-se colocar um *optimizer*, unidade em que se define algumas variáveis independentes e outras dependentes a fim de tentar aproximar os valores de energia. Apesar desta tentativa, não se conseguiu aproximar os valores.

Depois de uma breve revisão pela simulação achou-se uma possível explicação para esta diferença.

Anteriormente no reator o processo de separação do catalisador com os hidrocarbonetos era efetuado em colunas de pratos, no entanto, alterou-se passando a utilizar enchimento. O enchimento é particularmente diferente no processo de separação pois promove um contacto contínuo durante o processo, de modo que, a separação ocorre de forma mais eficiente.

Devido a esta maior eficiência a quantidade que vai para o *combuster* tem menos hidrocarbonetos logo não há tanta queima o que por sua vez faz com que não haja tanta energia para retirar no *Cat Cooler*.

4.3 Programação em R – Previsão de Cargas

4.3.1 Cargas de Hydrocracker -Possíveis Correlações entre as variáveis do *Test-Run*

Como foi falado na seção 3.4.1 fez-se algumas análises com histogramas, como por exemplo o caso do enxofre e massa volúmica que se encontra nas figuras. Com esta análise verificou-se através dos histogramas a frequência e correlação de resultados do enxofre e massa volúmica que por fim não se detetou nenhuma possível relação entre as variáveis como se verifica.

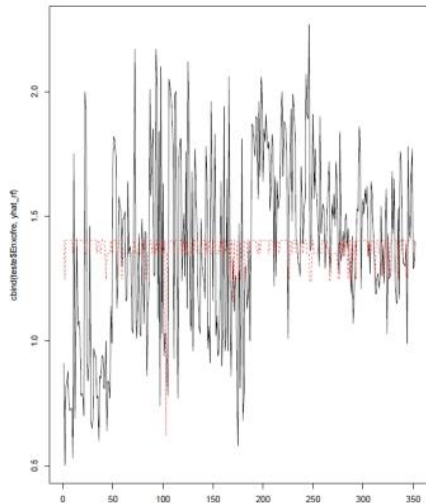


Figura 4.54 - Teste para a comparação de enxofre com a massa volúmica(Random Forest)

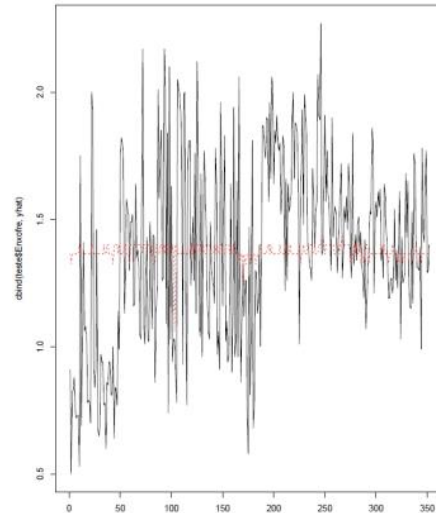


Figura 4.55 - Teste para a comparação de enxofre (teste treino)

O gráfico 4.57 mostra através da intensidade das cores e do tamanho dos círculos as possíveis relações, sendo o valor 1 como a variável que evidencia que existe uma relação direta e proporcional entre as variáveis e sendo o -1 a variável que revela uma relação inversa e proporcional, por fim o valor de 0 indica que não existe qualquer tipo de relação.

Através do programa R obteve-se uma matriz com as diferentes variáveis do *test-run* que por intermédio de diversos testes transformou-se em diferentes gráficos que foram analisados.

Evidentemente verifica-se nas diagonais círculos azuis escuros correspondentes à relação entre cada variável e ela própria. À parte disso não se identificam correlações particularmente notáveis a ponto de se considerarem.

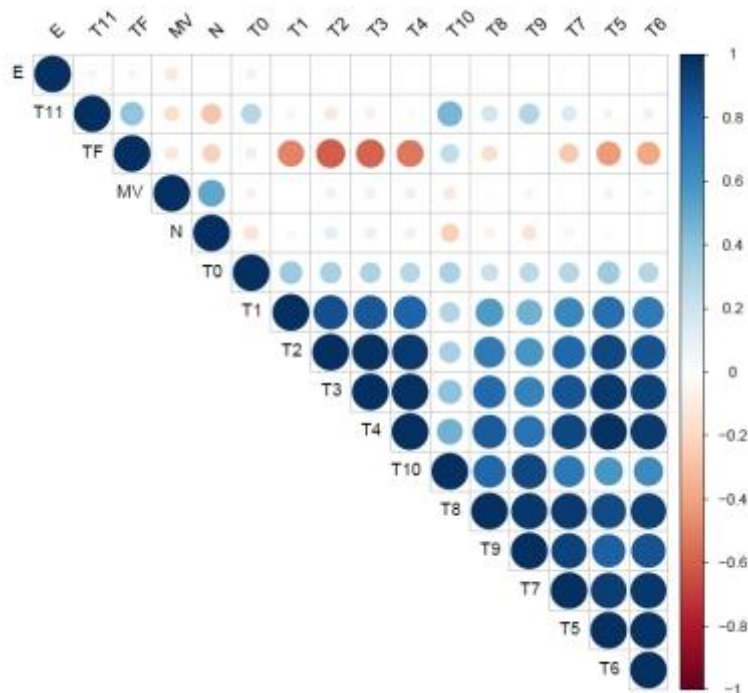


Figura 4.56-Matriz Correlação com todas as variáveis

No sentido de verificar a veracidade das conclusões anteriores criou-se com um modelo de teste, ou seja, uma nova matriz que se encontra representada abaixo que contém os respetivos valores dos fatores. Com esta nova matriz identificou-se um valor de 0.52 para a correlação entre a massa volúmica e o azoto.

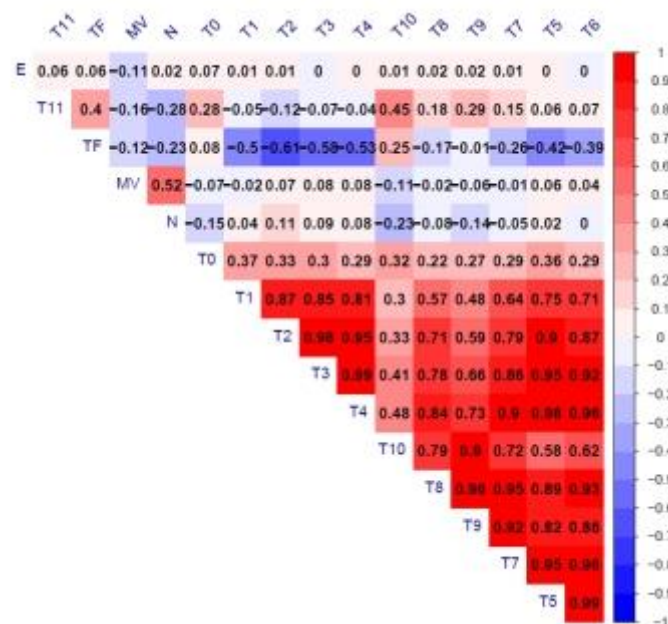


Figura 4.57-Matriz Correlação com os respetivos números

No modelo de simulação do *hydrocracker* no Petro-SIM™ existe uma determinada secção onde está demonstrada algumas das características da carga estas encontram-se na figura 4.59.

Arsenic Content	✓
Asphaltenes Content	✓
Bromine Number	✓
Carbon Content	✓
Cloud Point	✓
Conradson Carbon Content	✓
Core Aromatics	✓
Core Naphthenes	✓
Freeze Point	✓
Hydrogen Content	✓
Liq. Mass Density (Std. Cond) (Dry)	✓
Mass Flow	✓
Nickel Content	✓
Nitrogen Content	✓
Pour Point	✓
Pressure	✓
Silica Content	✓
Std Ideal Liq Vol Flow	✓
Sulfur Content	✓
Temperature	✓
Vanadium Content	✓
Very Difficult Sulfur Content	✓
Viscosity (Kinematic)_50	✓
Viscosity (Kinematic)_100	✓

Figura 4.58-Características da simulação do *hydrocracker*

Selecionaram-se as características tais como: *Arsenic, Bromine Number, Carbon Content, Conradson Carbon, Core Aromatics, Core Naphthenes, Hydrogen, Density, Sulfur, Nickel, Nitrogen, Silica, Vanadium, Viscosity.*

Com todas estas variáveis criou-se novamente uma matriz com todas as variáveis juntas para verificar quais poderiam ter algum tipo de relação. Retirou-se os valores e colocou-se em Excel por uma questão de facilidade em notar os valores.

	MV	N	Ar	E	NB	Ni	RC	SL	TO	V	VC
MV	1	0,042524	-0,26328	-0,21049	0,04918	-0,08446	0,194946	0,246021	-0,10019	0,312946	0,182025
N		1	0,040516	-0,0523	0,437852	0,068649	0,336586	-0,1267	0,123604	-0,24211	0,101622
Ar			1	-0,13424	-0,05278	0,186267	-0,07919	0,137638	-0,41475	-0,51163	-0,03934
E				1	-0,1121	0,364951	-0,15605	0,444239	0,553528	-0,11502	-0,21428
NB					1	-0,26612	-0,00249	-0,55553	-0,08561	-0,17058	-0,20967
Ni						1	0,320036	0,508987	-0,26439	0,012639	0,252045
RC							1	-0,15135	-0,1115	0,159828	0,47212
SL								1	0,000154	0,050499	0,264957
TO									1	0,087351	-0,15986
V										1	0,421785
VC											1

Tabela 4.5-Matriz Correlação com determinadas características

No Excel realçou-se os valores que se consideraram interessantes, efetuaram-se análises a todos, no entanto sem sucesso. Nos gráficos não havia um único que se conseguisse retirar uma relação matemática que conseguisse assim traduzir e simular uma situação futura.

O mesmo sucedeu quando se tentou juntar diversas variáveis, apesar de se verificar pequenas relações, efetuou-se testes para tentar encontrar relações, mas sem sucesso.

4.3.2 Cargas de Hydrocracker -Possíveis Correlações entre os componentes da mesma

Após a análise efetuada às variáveis do *test-run* considerou-se interessante verificar se havia alguma relação entre as quantidades de diferentes componentes que fazem parte da carga, encontra-se em baixo o gráfico produzido.

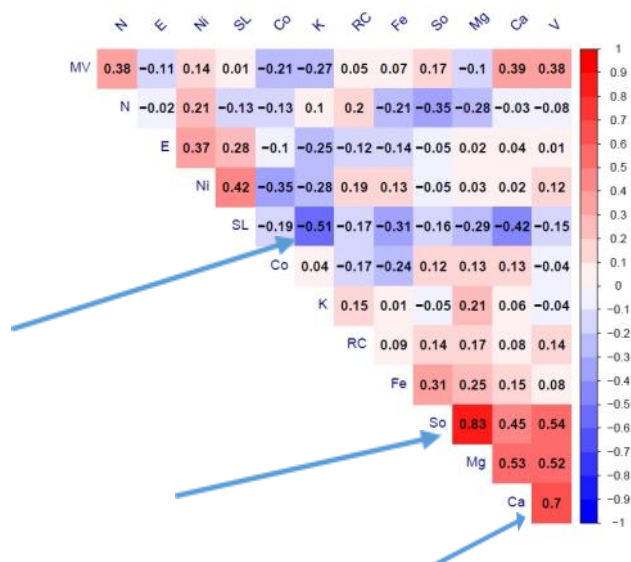


Figura 4.59-Gráficos com as relações que tem possibilidade de correlação

Verificou-se diferentes relações com valores mais elevados, os mesmos encontram-se na tabela 4.6.

Tabela 4.6 - Relações com possibilidade de correlação

Variáveis	Valores
Silício com Potássio	-0.51
Sódio com Magnésio	0.83
Cálcio com Vanádio	0.7

Posteriormente efetuaram-se análises às variáveis que se concluíram terem uma possibilidade de correlação. Primeiramente selecionou-se o silício e o potássio que apresentaram uma relação inversamente proporcional de 0.51, neste caso efetuou-se dois tipos de teste que confirmam desta forma o comportamento idêntico ao longo do tempo mas efetivamente é complicado conseguir definir uma relação matemática.

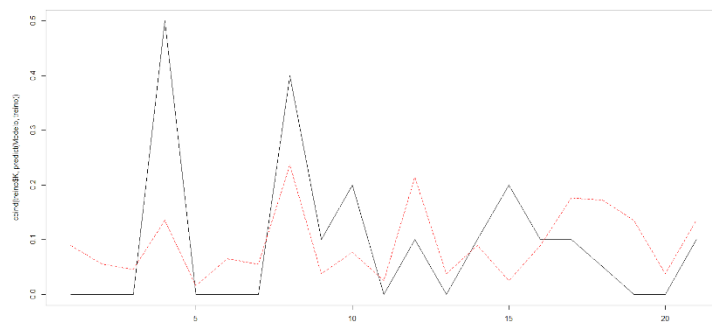


Figura 4.60 - Silício e Potássio

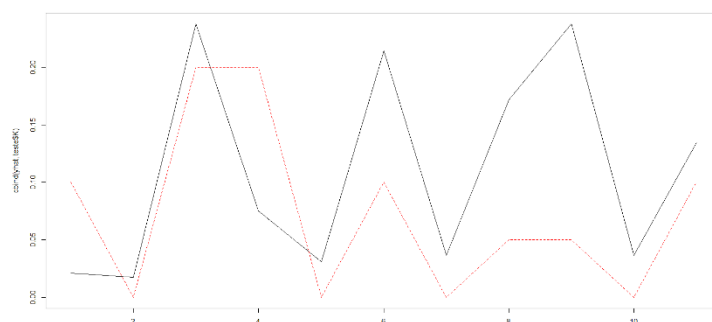


Figura 4.61 - Silício e Potássio continuação

Em relação ao sódio e magnésio não foi possível realizar comparação devido a uma falha na base de dados.

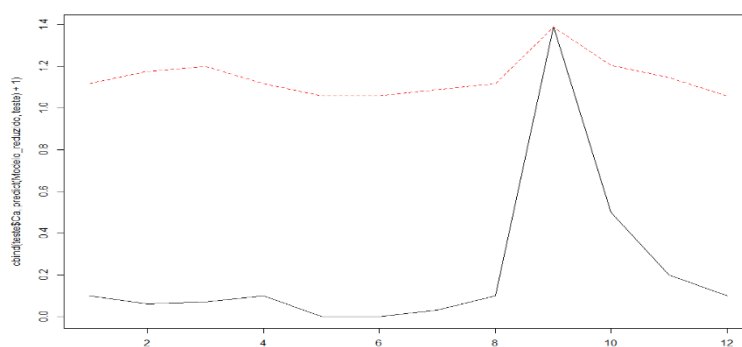


Figura 4.62 – Cálcio e Vanádio

Relativamente ao cálcio e vanádio o gráfico mostra apenas contêm um ponto em comum e pouca proximidade de valores o que demonstra que não é possível estabelecer qualquer tipo de relação.

4.3.3 Análise às cargas do Hydrocracker com restantes unidades

Nesta nova fase continha-se dados dos dois tanques e da carga à destilação a vácuo.

Posteriormente construiu-se diferentes gráficos de todas as características das cargas, com o objetivo de verificar a densidade e semelhança entre eles.

Apesar dos gráficos darem uma percepção da eventual similaridade dos mesmos foi mais vantajoso efetuar uma tabela com o valor da variável R^2 , regressão linear, que basicamente é um valor que traduz a proximidade dos mesmos. Para um valor de proximidade é necessário o R se aproximar de 1.

Abaixo encontra-se a tabela 4.7 para o vácuo e cada tanque com os respetivos valores de R^2 .

Tabela 4.7 - Resultados da Análise ao R^2

	Destilação a Vácuo	Tanque 425	Tanque 424
Massa Volúmica	-0.009	0.15	0.12
IBP	-0.09	0.001	0.02
FBP	-0.08	0.13	0.03
Níquel	-	0.56	-0.05
Vanádio	-0.04	-0.006	0.20
Azoto	-	0.28	0.11
Enxofre	0.005	0.12	0.10
R.Carbonoso	-	-	-
Número de Bromo	-	0.007	0.92
V.Cinemática	-	0.78	0.10

As células da tabela que contêm um hífen simbolizam os casos em que não foi possível efetuar a análise devido à ausência de dados, em relação aos dados a negrito assinalam os valores mais altos.

Inicialmente os valores a negrito seriam os mesmos que teriam potencial para conseguir-se definir uma relação matemática entre os mesmos. No entanto, após a verificação das bases de dados do mesmo averiguou-se que têm em média 10 valores numa da amostra e então automaticamente o programa assume que tem semelhanças, mas de facto tem apenas poucos dados para fazer a análise requerida.

Esta análise foi concluída sem sucesso, pois não se conseguiu achar qualquer relação matemática.

4.4 Splitter de Propileno

4.4.1 Caso de estudo: *High Pressure System*

Após a metodologia enunciada na secção 3.1.2 o modelo de simulação convergiu e verificou-se que as correntes de topo e do fundo estavam idênticas às do artigo. A figura 4.64 e 4.65 mostra mais em detalhe os resultados obtidos que se confirmam idênticos aos resultados da tabela 4.8 definidos no artigo.

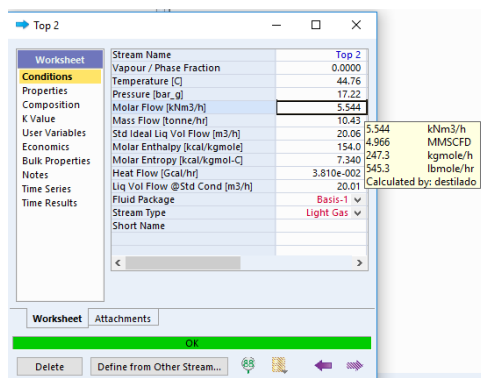


Figura 4.63 - Resultado da corrente de topo

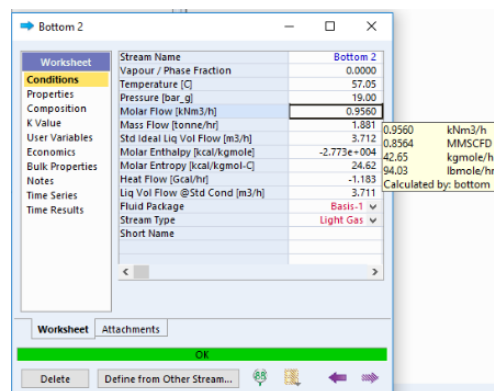


Figura 4.64 - Resultado da corrente de fundo

Tabela 4.8 – Resultados pormenorizados das correntes

Parâmetros	Topo	Fundo
Fração em Vapor	0	0
Temperatura (°C)	41.75	54.24
Pressão(bar)	17.22	19.25
Caudal Molar(kgmole/h)	246.96	43.74
Caudal Mássico (kg/h)	10419.80	1942.57
Caudal Volumétrico (m3/h)	20.03	3.79
Fração Molar Propileno	0.946	0.043
Propano	0.054	0.957

Devido a esta semelhança de valores é possível concluir que o modelo está validado.

Após se efetuar a metodologia avançou-se com o artigo *Optimization of Propylene-Propane Distillation Process* partindo para novas simulações [64].

Nestas novas simulações a pureza de propileno e de propano na corrente de topo e do fundo tem valores idênticos.

Apesar da alteração na alimentação, a corrente de saída de propileno da simulação assume valores de fração em massa iguais aos do artigo. Relativamente aos valores da corrente do fundo da coluna estes diferem devido ao facto de no artigo o heptano fazer parte desta corrente. Em relação à corrente de gás a sua função principal seria retirar da coluna os compostos leves, compostos estes que na simulação efetuada foram ignorados, desta forma na presente simulação sai pela corrente de gás maioritariamente propileno.

Após a simulação destes dois casos de estudo foi selecionado o segundo caso e a corrente foi alterada colocando-se a corrente real de propileno do modelo do FCC. Com este modelo conseguiu-se atingir os seguintes resultados.

Worksheet	Stream Name	Top4
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000
Properties	Temperature [C]	42.64
Composition	Pressure [bar_g]	16.66
K Value	Molar Flow [km3/h]	6.496
User Variables	Mass Flow [tonne/hr]	12.20
Economics	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	23.43
Bulk Properties	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	1373
Notes	Molar Entropy [kcal/kgmol-C]	6.269
Time Series	Heat Flow [Gcal/hr]	0.3979
Time Results	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	23.37
	Fluid Package	Basis-1
	Stream Type	Light Gas
	Short Name	

Tabela 4.9-Características da corrente de topo

Worksheet	Stream Name	Fundo4
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000
Properties	Temperature [C]	52.14
Composition	Pressure [bar_g]	17.56
K Value	Molar Flow [km3/h]	2.132
User Variables	Mass Flow [tonne/hr]	4.179
Economics	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	8.228
Bulk Properties	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2.530e+004
Notes	Molar Entropy [kcal/kgmol-C]	23.45
Time Series	Heat Flow [Gcal/hr]	-2.406
Time Results	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	8.223
	Fluid Package	Basis-1
	Stream Type	Light Gas
	Short Name	

Tabela 4.10-Características da corrente do fundo

A composição em massa da corrente de topo assume uma fração em massa de propileno de 99.03% e a corrente de fundo contém ainda 8.11% em massa de propileno.

É importante relembrar que estes casos são do tipo *High Pressure System*, dito isto avançou-se para uma análise do *Heat Pumped System*.

4.4.2 Caso de estudo: *Heat Pumped System*

Com o procedimento indicado na seção 3.5.3 tentou-se simular o novo modelo, no entanto,este não convergiu, apresentando como erro “feed properties invalid”, apesar da alimentação se apresentar sem qualquer erro como se apresenta na figura 4.66, o modelo não convergiu.

Worksheet	Stream Name	propileno 2
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.3700
Properties	Temperature [C]	54.33
Composition	Pressure [bar_g]	20.00
K Value	Molar Flow [km3/h]	58.12
User Variables	Mass Flow [tonne/hr]	112.0
Economics	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	217.7
Bulk Properties	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-1.130e+004
Notes	Molar Entropy [kcal/kgmol-C]	20.13
Time Series	Heat Flow [Gcal/hr]	-29.29
Time Results	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	217.3
	Fluid Package	Basis-1
	Stream Type	Light Gas
	Short Name	

Figura 4.65-Características da alimentação.

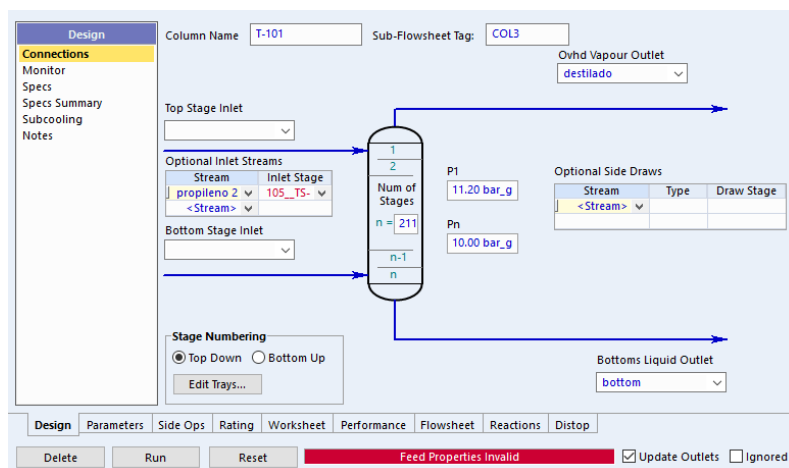


Figura 4.66-Ambiente da coluna onde aparece o erro

Devido a este erro que não se conseguiu solucionar avançou-se noutro sentido.

4.4.3 Caso de estudo: C3 Splitter

Este modelo foi então simulado, verifica-se que a alimentação se apresenta um pouco diferente devido às frações em massa do propileno e propano, 58.87% e 41.13% respetivamente, todas as características apresentam-se abaixo.

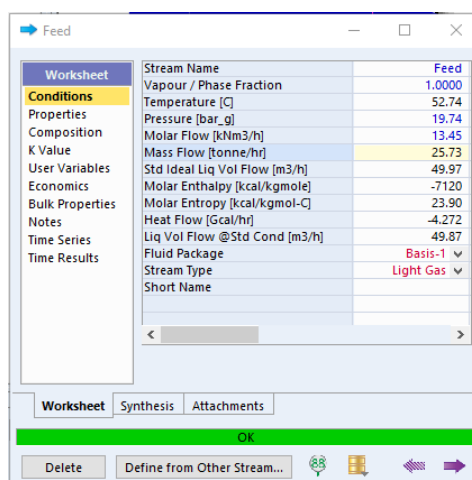


Figura 4.67-Característica da corrente de entrada do C3 Splitter

Relativamente à coluna o condensador é total e as características da mesma encontram-se na tabela 4.11:

Tabela 4.11 – Características da coluna

	Número de pratos	Pressão Condensador	Pressão revaporizador	Entrada de alimentação	Razão de Refluxo	Caudal Volumétrico
Valores	94	18.29 bar	19.67 bar	47	16.4	7.870 kNm ³ /h
						Especificações Impostas

Relativamente aos resultados são os seguintes:

Worksheet	Stream Name	Propene
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000
Properties	Temperature [C]	46.65
Composition	Pressure [bar_g]	18.29
K Value	Molar Flow [km3/h]	7.870
User Variables	Mass Flow [tonne/hr]	14.78
Economics	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	28.39
Bulk Properties	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	1440
Notes	Molar Entropy [kcal/kgmol-C]	6.715
Time Series	Heat Flow [Gcal/hr]	0.5058
Time Results	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	28.31
	Fluid Package	Basis-1
	Stream Type	Light Gas
	Short Name	

Figura 4.68-Resultados da corrente de topo

Worksheet	Stream Name	Propane
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000
Properties	Temperature [C]	57.56
Composition	Pressure [bar_g]	19.67
K Value	Molar Flow [km3/h]	5.578
User Variables	Mass Flow [tonne/hr]	10.95
Economics	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	21.58
Bulk Properties	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2.608e+004
Notes	Molar Entropy [kcal/kgmol-C]	24.41
Time Series	Heat Flow [Gcal/hr]	-6.490
Time Results	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	21.57
	Fluid Package	Basis-1
	Stream Type	Light Gas
	Short Name	

Figura 4.69-Resultados da corrente de fundo

Relativamente à corrente de saída de propileno do topo a fração em massa do propileno é 98.81 % e a de propano é de 1.19%. A corrente de fundo tem ainda resíduos de propileno com 4.935 % em massa, tendo em conta que o caudal mássico é de 10.95 tonelada por hora.

4.4.4 C3 Splitter aplicado à respetiva corrente de propileno do FCC

Com o modelo já pré-definido do C3 *Splitter* foi pertinente implementar a corrente de propileno do modelo do FCC e analisar a coluna otimizando com este mesmo ponto de partida.

A análise de sensibilidade teve diferentes etapas que se encontram explicadas abaixo.

Segundo a metodologia da seção 3.5.5 primeiro iniciou-se a análise verificando a posição e o número de pratos da alimentação.

1ª Etapa-Posição e número de pratos

Inicialmente o prato de alimentação era o 47 por isso a análise foi feita indo de encontro a uma análise baseada em adicionar ou remover pratos mantendo a alimentação. Para efetuar análise aos pratos efetuou-se uma abordagem simples, adicionando-se 20 pratos abaixo e acima da linha de alimentação, definindo como se ilustra na figura 4.71 do Petro-SIM™. Também se verificou o impacto de um maior número de pratos na coluna de retificação.

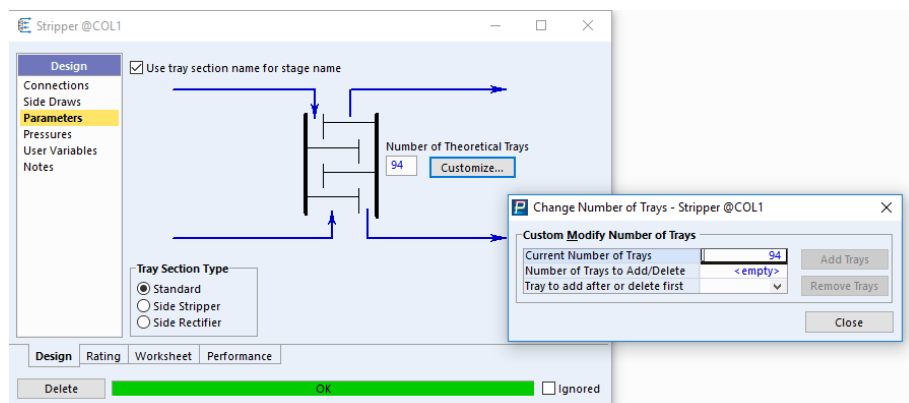


Figura 4.70-Ambiente onde se definiu os pratos

Tabela 4.12 – Resultados da análise aos pratos

1.1. Posição dos pratos a mais					
	Coluna		Propileno		Propane
	Pratos	Prato Alimentação	tonne/hr	%	tonne/hr
Situação Inicial	94	47	13.42	0.9513	3.314
mais 20 abaixo de 47	114	47	13.43	0.9513	3.306
mais 20 acima de 47	114	67	13.42	0.9513	3.313
mais 20 no rectifier			13.42	0.9513	3.314

Apesar disso como se verificou um valor mais alto de corrente de 13.43 tonelada/hora, que correspondia à adição de pratos abaixo da alimentação considerou-se importante verificar a influência dos diferentes números de pratos.

Tabela 4.13 – Resultados da análise aos diferentes números de pratos

1.2. Número de pratos					
	Coluna		Propileno		Propane
	Pratos	Prato Alimentação	tonne/hr	%	tonne/hr
mais 10 abaixo de 47	104	47	13.42	0.9513	3.308
mais de 15 abaixo de 47	109	47	13.43	0.9513	3.307
mais 20 abaixo de 47	114	47	13.43	0.9513	3.306

Também se efetuou a análise no sentido contrário, ou seja, retiraram-se pratos na coluna de fracionamento o que demonstrou posteriormente que os pratos não intervêm na operação da coluna. Os valores dos calores do condensador e revaporizador também foram sempre verificados ao longo do tempo o que mostrou que a diferença do número de pratos também não tinha qualquer influência.

Para uma análise mais completa verificou-se na coluna de retificação somente se haveria impacto na diminuição dos pratos.

Tabela 4.14 - Resultados da análise aos diferentes números de pratos do *rectifier*

5.Pratos do <i>rectifier</i>					
Pratos	Propileno		Propane		Utilidades
	tonne/hr	%	tonne/hr	%	Q condenser
29	13.42	0.9513	3.307	0.9973	16.33
39	13.42	0.9513	3.307	0.9974	
49	13.43	0.9513	3.307	0.9975	
59	13.43	0.9513	3.307	0.9975	
69	13.43	0.9513	3.307	0.9975	
79	13.43	0.9513	3.307	0.9976	
Inicial_89	13.43	0.9513	3.307	0.9976	

Os pratos verificam-se novamente que também nesta coluna não tem impacto desta forma reduziram-se de 89 para 79 de modo a ter exatamente os mesmos resultados.

Apesar disso considerou-se para o resto da análise 109 pratos em vez dos iniciais 94, devido ao valor de 13.43 tonelada por hora, apesar de que, a nível económico provavelmente não compensaria.

2ª Etapa-Posição da Alimentação

Pela tabela apresentada, 4.15, verifica-se que a posição da alimentação não é de todo influenciada, e por isso manteve-se a escolha inicial do modelo o prato 47.

Tabela 4.15 - Resultados da análise às diferentes posições da alimentação

2.Posição da alimentação					
Prato da Alimentação	Propileno		Propane		Utilidades
	tonne/hr	%	tonne/hr	%	Q condenser
17	13.43	0.9513	3.306	0.9979	20
27	13.43	0.9513	3.306	0.9979	20
37	13.43	0.9513	3.306	0.9979	20
47	13.43	0.9513	3.307	0.9976	20
55	13.42	0.9513	3.308	0.9973	19.99

3ª Etapa-Razão de Refluxo

Posteriormente foi necessário verificar a melhor razão de refluxo, à partida o aumento da razão de refluxo fará aumentar a utilidade do condensador visto que têm entre si uma relação diretamente proporcional.

Tabela 4.16 - Resultados da análise às razões de refluxo

3.Razão de Refluxo					
Razão de refluxo	Propileno		Propane		Utilidades
	tonne/hr	%	tonne/hr	%	Q condenser
10	13.42	0.9513	3.312	0.9961	12.63
12	13.42	0.9513	3.307	0.9974	14.93
14	13.43	0.9513	3.307	0.9976	17.23
16	13.43	0.9513	3.306	0.9977	19.53
18	13.43	0.9513	3.306	0.9978	21.83
20	13.43	0.9513	3.306	0.9978	24.13

Verifica-se como previsto o aumento da quantidade de utilidade necessária e ainda relativamente ao caudal da corrente de fundo verifica-se algumas diferenças nos mesmos e nas respetivas percentagens de fração em massa. Dito isto considerou-se como razão de refluxo ótima a de 14 baseando esta decisão na quantidade de propano que saia no fundo e a utilidade.

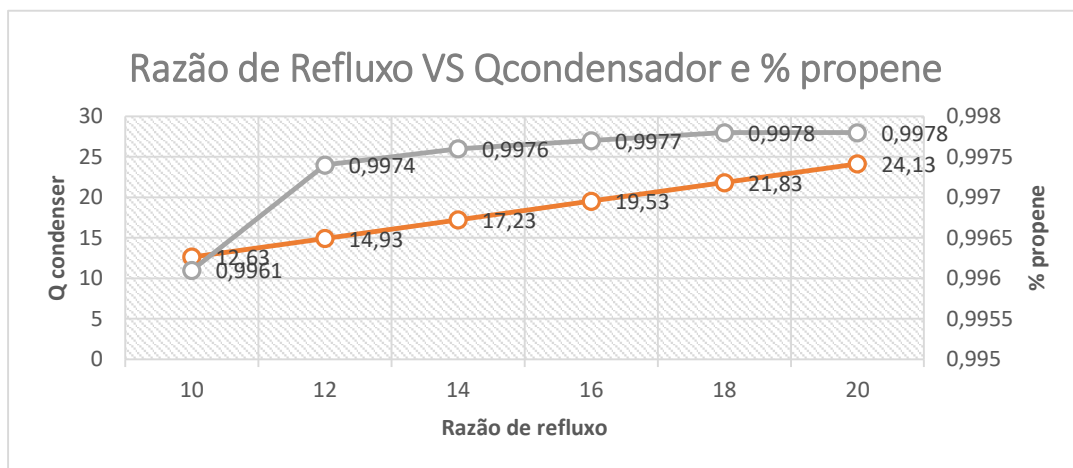


Figura 4.71 - Gráfico da percentagem mássica em função da utilidade do condensador para diferentes valores de razão de refluxo.

4ª Etapa-Pressões

Nesta fase verificou-se os efeitos das pressões, apesar de se ter cumprido o mesmo intervalo estas pressões foram definidas na janela que define a coluna e por isso mesmo foram definidas pressões para o condensador e revaporizador como se ilustra na figura 4.73.

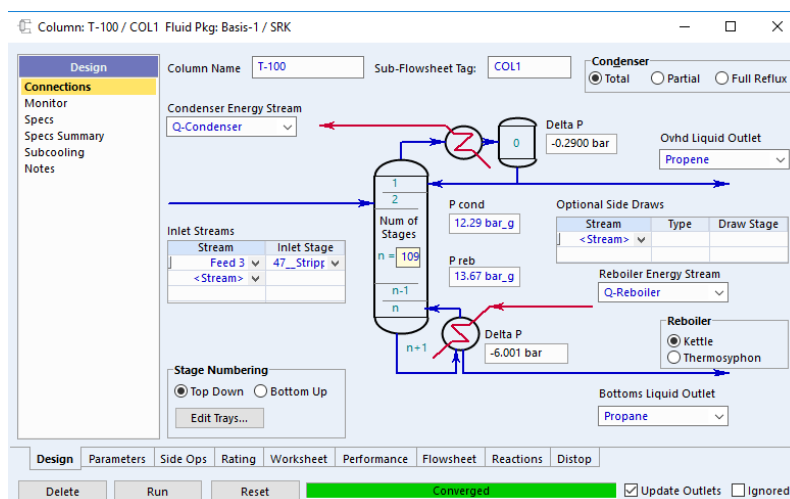


Figura 4.72-Ambiente onde se definiu as diferentes pressões

Tabela 4.17 - Resultados à análise das pressões

5.Pressões						
Pressões	Propileno		Propane		Utilidades	
	tonne/hr	%	tonne/hr	%	Q condensar	Q revap.
11.29-12.67	13.43	0.9513	3.307	0.9976	16.77	15.32
12.29-13.67	13.43	0.9513	3.307	0.9976	16.33	14.88
13.29-14.67	13.42	0.9513	3.307	0.9975	15.9	14.49
14.29-15.67	13.42	0.9513	3.307	0.9975	15.49	14.11
15.29-16.67	13.42	0.9513	3.307	0.9974	15.08	13.75
16.29-17.67	13.42	0.9513	3.308	0.9973	14.69	13.39
17.29-18.67	13.42	0.9513	3.308	0.9972	14.31	13.04
18.29-19.67	13.43	0.9513	3.308	0.9971	13.94	12.81

Com o gráfico abaixo verifica-se nitidamente que o aumento de pressão diminui tanto a utilidade do condensador como do revaporizador.

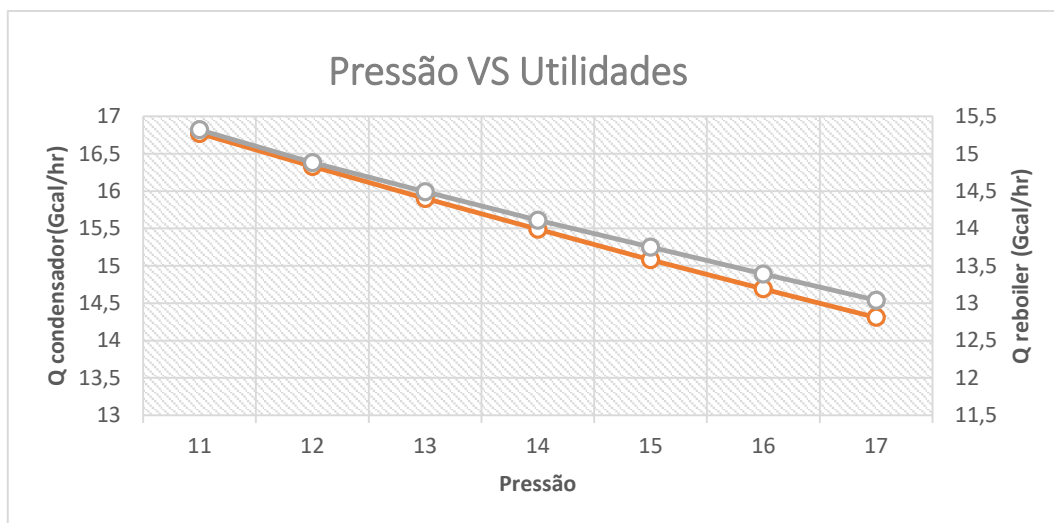


Figura 4.73 - Gráfico das pressões em função das utilidades. Ex: o 11 é representativo do 11.29-12.67 bar.

Apesar de visualmente a melhor pressão de operação parecer a maior é necessário relembrar que para a coluna operar a esta pressão será necessário um compressor que exerce mais energia por isso não se pode seguir de forma linear esta análise. Esta análise também foi efetuada considerando a corrente de entrada à mesma pressão. Devido a este facto verificou-se em artigos qual a melhor pressão de operação tendo em conta todos os custos.

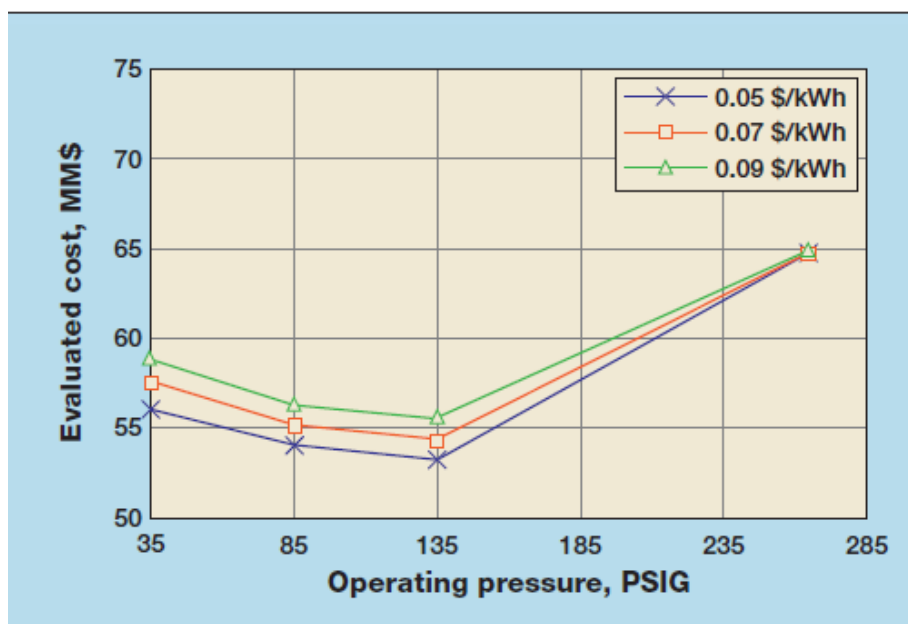


Figura 4.74-Pressão de operação em função dos custos

Com a figura 4.75 cima verifica-se que para um menor custo possível a pressão a operar seria de 135 psig (9.3 bar), esta pressão para o caso em questão não foi verificada, mas consegue-se perceber pelo gráfico que à medida que a pressão aumenta a partir dos 135 psig os custos aumentam linearmente. Desta forma à partida seleccionar-se-ia o intervalo de pressões de 12.29-13.67 bar pois verifica-se no gráfico que apresenta menores custos que pressões próximas de 16 e 19 bar.

Ainda assim foi necessário verificar a quantidade de energia necessária no compressor que se iria colocar antes da coluna e fazer então o balanço de forma a verificar o que foi dito anteriormente.

Tabela 4.18 - Resultados da análise à energia do compressor e balanço de todas as energias utilizadas

6.Pressões vs Q						
Pressões	FEED	Compressor	Preço	Condensador	Revap.	Total de Energias
	pressão	Gcal/hr	Ecomp*Eur/Gcal	Gcal/hr		
12.29-13.67	14	0.1475	988.0848	16.33	14.88	31.3575
13.29-14.67	15	0.1656	1109.334528	15.9	14.49	30.5556
14.29-15.67	16	0.1825	1222.5456	15.49	14.11	29.7825
15.29-16.67	17	0.1985	1329.72768	15.08	13.75	29.0285
16.29-17.67	18	0.2136	1430.880768	14.69	13.39	28.2936
17.29-18.67	19	0.2275	1523.9952	14.31	13.04	27.5775

Apesar de se apurar a relação da pressão com a energia, relação esta inversamente proporcional, não é correto avaliar somente as energias, pois os custos são diferentes. No sentido em que a água de refrigeração tem um custo associado diferente da energia elétrica e também do vapor, e por isto não se pode seguir um raciocínio linear. Por esta mesma razão o gráfico da figura 4.75 pode continuar correto pois o mesmo supostamente tem em conta estas peculiaridades.

Para finalizar esta fase foi importante então reunir as condições ótimas do modelo de *C3 splitter* para o respetivo caso.

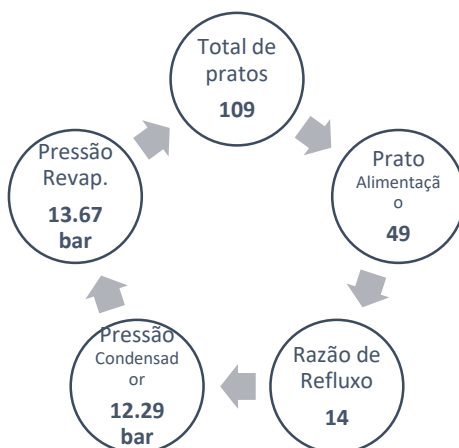


Figura 4.75 – Resultados do *C3 Splitter* aplicado à corrente de propileno do modelo FCC.

Antes de se passar para uma fase seguinte efetuou-se uma simulação duma coluna sem pratos, a título de curiosidade e devido ao facto de todas as análises efetuadas mostrarem que uma diferença no número de pratos não constitui grande diferença no processo.

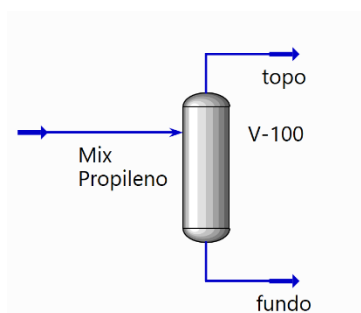


Figura 4.76-Novo modelo sem pratos

O Mix propileno constitui a corrente de entrada que se tem utilizado para os outros modelos já efetuados e a coluna definiu-se como ilustra na figura 4.78.

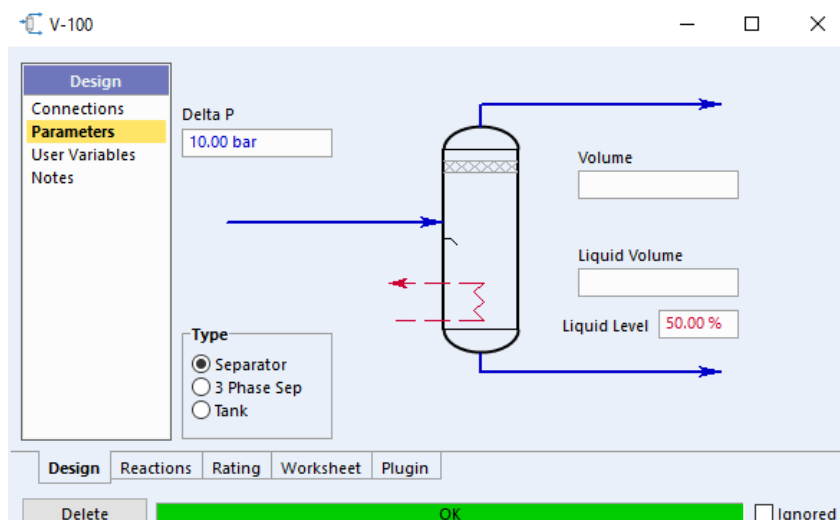


Figura 4.77-Variáveis do novo modelo sem pratos.

Após se definir que seria uma coluna com função de separação como se ilustra na figura 4.78 verificou-se que a coluna efetivamente não separava nada, apenas divide a corrente assumindo assim frações em massa idênticas. Através desta simulação apurou-se a importância dos pratos e por isso seguiu-se para a próxima fase.

4.4.5 Heat Pumped System + C3 Splitter

Segundo o procedimento que se encontra na seção 3.5.6 foi efetuada uma nova simulação com base no artigo do sistema de *Heat Pumped* e na análise de sensibilidade feita anteriormente ao *C3 Splitter*.

Dito isto foi simulada a nova configuração do sistema e para confirmar que se encontrava validada foi necessário comparar as energias do novo sistema com a energia do revaporizador da antiga coluna de *C3 Splitter*.

Properties	
Stream Name	Q-Reboiler
Heat Flow [Gcal/hr]	14.30
Ref. Temperature [C]	< empty >
Cost Based On Flow [Cost/day]	< empty >

Figura 4.78 - Energia do revaporizador do C3 Splitter otimizado

$Q_{reboiler1} + Q_{reboiler2} + Q_{comp} = 12.70 + 3.6 \times 10^{-2} + 1.557 = 14.293$
 Equação 4.1 - Energia de todas as utilidades.

Com o modelo validado, decidiu-se alterá-lo removendo o E-103, Tee-102 e o Mix-100.

O caso em questão foi então adaptado mantendo o compressor e o revaporizador 1 que efetua integração energética.

A razão pela qual se adaptou o sistema é pelo facto de não se conseguir encontrar uma vantagem em implementar o sistema por completo.

Primeiramente suspeita-se que seria mais correto efetuar a purga do propileno imediatamente após a bomba pois nesse momento a corrente encontra-se líquida. No artigo consultado efetua-se a purga após o revaporizador fazendo integração energética, o que pode fazer com que a corrente que saia para armazenagem já contenha algum vapor, algo indesejável nas especificações.

Posteriormente pensa-se que investir em diversas unidades não compensa pois seguramente o revaporizador tem como função arrefecer a corrente de propano que sai da coluna aquecendo assim a corrente de propileno para esta voltar à coluna.

A questão mais relevante é ainda o facto da temperatura de fundo e da temperatura de topo terem pouca diferença. Supondo que a coluna tem como pressão de topo 12.29 e pressão de fundo 13.67 bar as respetivas correntes têm como temperatura 30.69 e 42.46 °C.

A corrente de topo após sofrer compressão aumenta para uma temperatura de 52.60 °C, posteriormente esta corrente é encaminhada para o condensador onde ocorre a condensação, num primeiro teste considerando uma queda de pressão de 1 bar a temperatura sofre uma descida encontrando-se assim nos 43.70 °C.

Dito isto quando chega ao revaporizador a corrente de propileno que deveria aquecer encontra-se a 43.70 °C e a corrente que deveria ser aquecida encontra-se a 42.46 °C. Desta forma não se consegue efetuar nenhum aquecimento devido à proximidade de temperaturas.

Devido aos fatos enumerados adotou-se o esquema mais simples como se representa na figura seguinte.

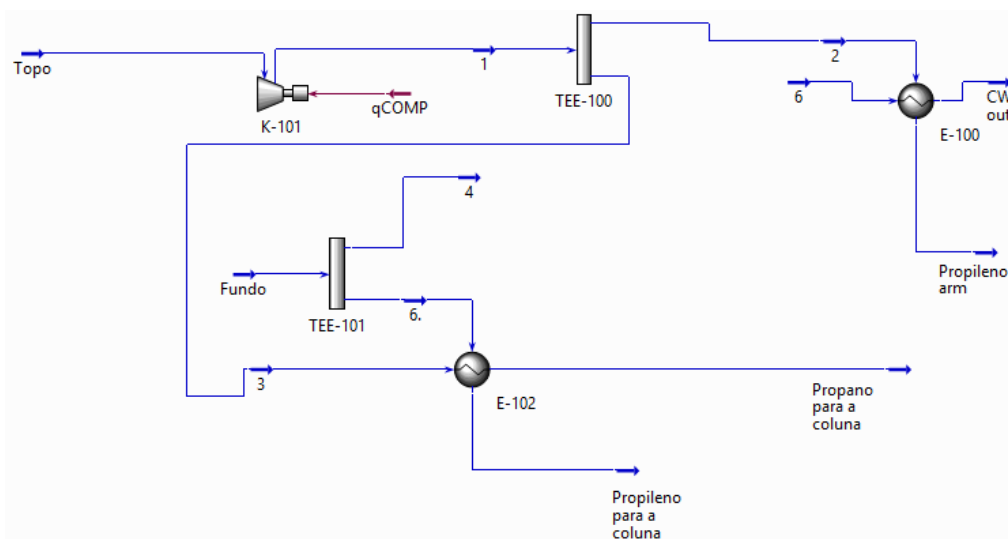


Figura 4.79-Novo esquema do *Heat Pumped System*

Neste momento é necessário então desenvolver novamente uma análise às pressões isto porque se decidiu colocar a pressão da corrente de entrada com um valor acima da pressão do fundo e anteriormente apenas se tinha colocado acima da pressão de operação. Posteriormente também se efetuou uma análise às condições de alimentação em particular às temperaturas da corrente de entrada com o objetivo de verificar se teria algum efeito.

1ª Etapa-Posição e número de pratos

Para efetuar análise aos pratos efetuou-se uma abordagem simples, adicionou-se e subtraiu-se 10/20 pratos à coluna de fracionamento e por curiosidade verificou-se um caso extremo em que se diminui

40 pratos. Devido às análises anteriores à partida não terá grande efeito ainda assim é importante averiguar.

Tabela 4.19 – Resultados da análise aos pratos.

1.Pratos e Posição da Alimentação							
	Coluna		Propileno		Propane	Utilidades	
	Pratos	Prato de alimentação	Ton./h	%m/m	Ton./h	Qcond.	Qreboi.
Situação Inicial	94	47	13.43	0.9513	3.306	15.86	14.36
20	114	54	13.43	0.9513	3.306	15.86	14.36
-20	74	36	13.43	0.9513	3.306	15.86	14.36
-40	54	20	13.43	0.9513	3.306	15.87	14.36
10	104	49	13.43	0.9513	3.306	15.86	14.36
-10	84	41	13.43	0.9513	3.306	15.86	14.36

Com estes resultados verifica-se que não há qualquer influência sobre os produtos de ambas as correntes e com os calores verifica-se o mesmo. Ainda assim verificou-se o *break point* como se mostra na tabela 4.20 sendo o mesmo de 70 pratos considerando ainda que a alimentação seria efetuada no quinto prato. Efetuou-se outros casos com um menor número de pratos como se demonstra na coluna, mas a alimentação foi necessário ser sempre acima do que estava considerado inicialmente para se obter os mesmos resultados.

Apesar de se ter verificado o *break point* decidiu-se optar pelos 94 pratos com a alimentação a ser efetuada no prato 47, para manter uma simulação fiel à realizada pelo Petro-SIM™. A razão pela qual não se optou por nenhum cenário dos que se encontra abaixo é pelo facto de estes cenários serem duplamente manipulados no sentido em que se alterou ao mesmo tempo o número de pratos e a entrada da alimentação.

Com este modelo já pré-definido foi pertinente implementar a corrente de propileno do modelo do FCC e analisar a coluna otimizando com este mesmo ponto de partida

Tabela 4.20 – Resultados da análise aos casos limite

1.1.Pratos e Posição da Alimentação			
Coluna		Propano	
Pratos	Prato de Alimentação	Ton./h	%propano
70	5	3,306	0.9979-0.0021
80	5-10-15	3,306	0.9979-0.0022
90	15	3,306	0.9979-0.0023
110	18	3,306	0.9979-0.0024

Também se verificou o impacto de um menor e maior número de pratos na coluna de rectificação mas não tinha qualquer efeito inclusive tentou determinar-se o *break point* mas sem sucesso.

2ª Etapa-Pressões

Esta é uma das etapas mais significativas pois irá fazer-se uma análise às energias do compressor da entrada, compressor de saída da coluna, energia do revaporizador que tem como função aquecer a corrente de fundo e arrefecer a de topo e por fim energia do condensador da corrente de propileno.

O compressor de entrada encontra-se simulado no Petro-SIM™ juntamente com a coluna de *splitter* do propileno enquanto que todas as outras unidades estão simuladas num diagrama com as respetivas correntes como se encontra na figura 4.80.

Tabela 4.21 – Resultados à análise de pressões.

2.Pressões					
Intervalo de pressões	Qcompressor	Qrevap.	Q compressor alimentação	Q condensador	Energia fornecida
bar	Gcal/hr	Gcal/hr	Gcal/hr	Gcal/hr	Gcal/hr
18.29-19.67	1.286	12.54	0.263	1.015	2.564
17.29-18.67	1.353	12.87	0.2504	1.041	2.6444
16.29-17.67	1.327	13.17	0.2372	1.06	2.6242
15.29-16.67	1.279	13.42	0.2233	1.079	2.5813
14.29-15.67	1.251	13.68	0.2088	1.097	2.557
13.29-14.67	1.045	13.55	0.1934	1.104	2.3424
12.29-13.67	1.091	11.95	0.1771	1.132	2.4001
11.29-12.67	1.336	14.66	0.1598	1.171	2.6668
10.29-11.67	1.438	14.98	0.1413	1.2	2.7793

Para uma melhor interpretação dos valores encontram-se abaixo os gráficos das pressões relativas às diferentes utilidades. Para uma maior facilidade na interpretação dos gráficos, por exemplo, o valor de 10.29 é representativo do 10.29-11.67 bar.

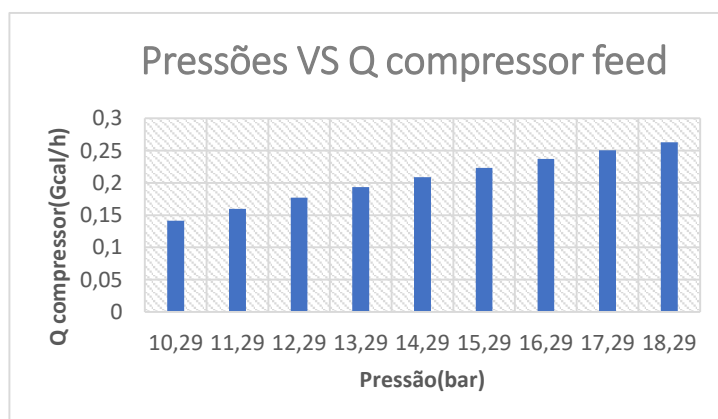


Figura 4.80 – Pressões em função da energia do compressor do feed.

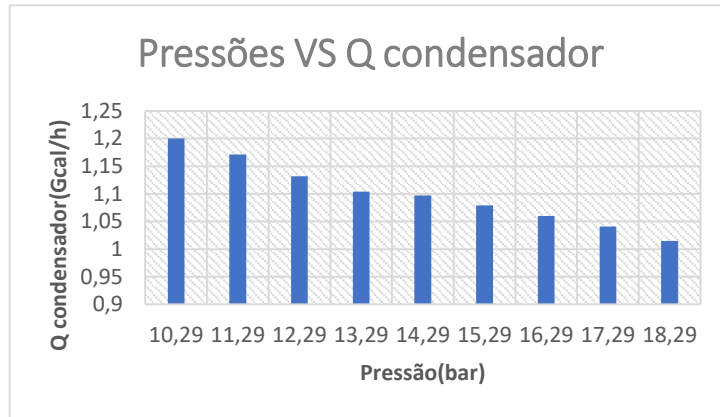


Figura 4.81 – Pressões em função da energia do condensador.

Em ambos os gráficos verifica-se uma relação praticamente linear

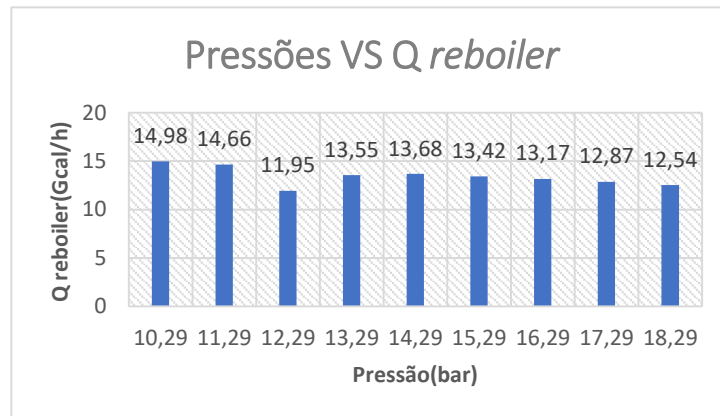


Figura 4.82 – Pressões em função da energia do revaporizador.

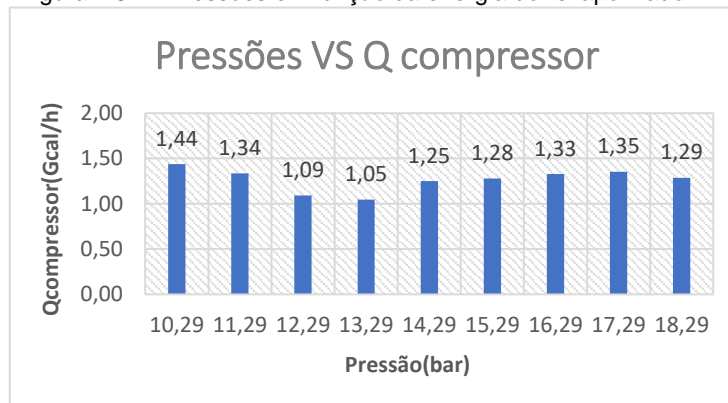


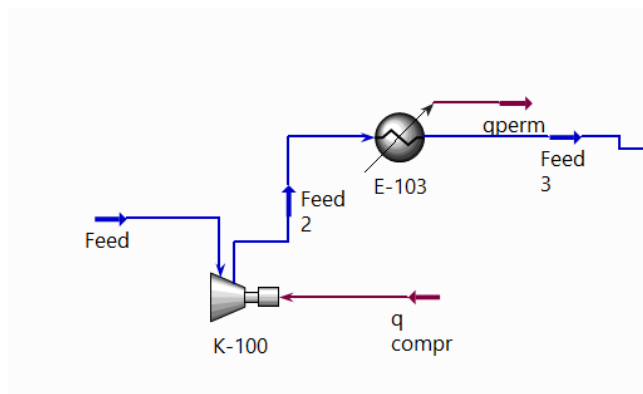
Figura 4.83 – Pressões em função da energia do compressor.

Em relação às energias necessárias no compressor e revaporizador não se comprova nenhuma relação em nenhum dos casos, no entanto, verifica-se que a pressão de 13.29 é a que exige menor energia do compressor. É importante referir que o compressor trabalha a energia elétrica o que tem ainda mais peso sobre a decisão pois a energia elétrica é mais dispendiosa que as outras utilidades.

$$Q_{comp. (13.29)_{entrada}} - Q_{comp. (12.29)_{entrada}} = 0.1934 - 0.1771 = 0.0163 \frac{Gcal}{hr}$$
$$Q_{compressor}(12.29) - Q_{compressor}(13.29) = 1.09 - 1.05 = 0.05 \frac{Gcal}{hr}$$

Com os cálculos que estão acima verifica-se que compensa utilizar a pressão de 13.29 bar como pressão de topo.

Após estas alterações na temperatura verificou-se que não havia qualquer vantagem pois a temperatura não tinha qualquer efeito. Deste modo eliminou-se o permutador que inicialmente se tinha definido.



106

4ª Etapa-Razão de Refluxo

Até este momento a razão de refluxo sempre foi 14, no entanto, é necessário verificar diferentes valores de razão de refluxo.

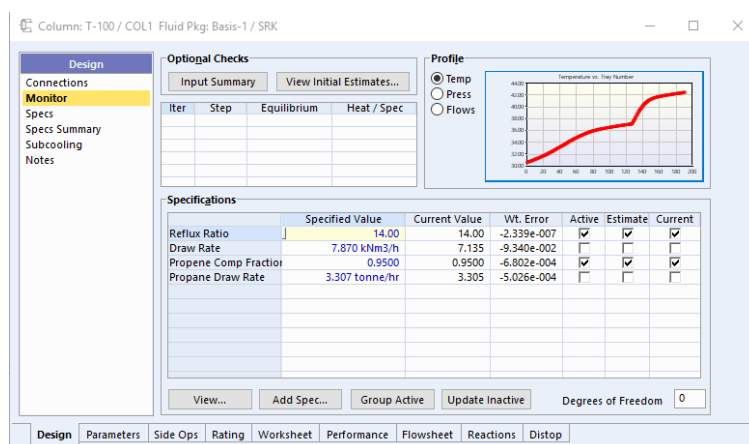


Figura 4.85-Variáveis definidas durante o processo

Para poder efetuar uma análise à razão de refluxo, diminui-se um grau de liberdade na coluna por isso mesmo foi necessário definir novas variáveis, sendo assim para substituir a razão de refluxo foi definida a composição em massa de propano. Com esta nova alteração a razão de refluxo era assim gerada à medida que se aumentava a composição em massa.

Tabela 4.22 - Resultados à análise da razão de refluxo

4.Razão de Refluxo				
RR	Propano	Propileno	i-Butane	Q condensador
	%m/m			Gcal/h
14	0.9973	0.0006	0.0021	15.98
14.84	0.9974	0.0005	0.0021	16.74
15.86	0.9975	0.0004	0.0021	17.82
17.44	0.9976	0.0003	0.0021	19.49
20.24	0.9977	0.0002	0.0021	22.48
27.19	0.9978	0.0001	0.0021	29.86

Como já era de prever com o aumento da razão de refluxo, aumenta o caudal da corrente de topo o que depois se traduz num aumento da necessidade de energia do condensador por este motivo e devido à diferença mínima de quantidades de produto optou-se por manter a razão de refluxo inicial.

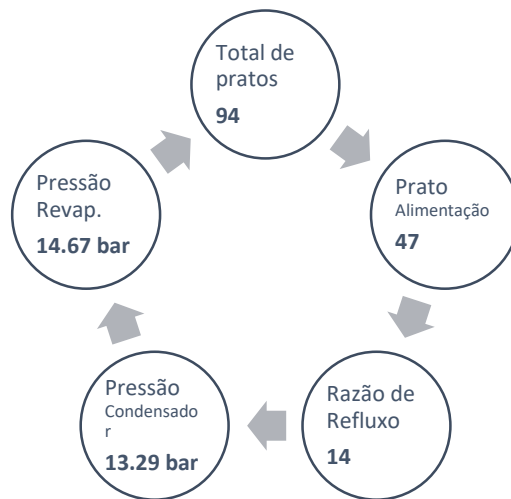


Figura 4.86-Resultados do *C3 Splitter* no sistema de *Heat Pumped*

5 Conclusão

5.1 Validação e Calibração do Hydrocracker

Na primeira fase do processo relativo ao HC procedeu-se a estratégias que envolviam o *workbook*(Excel) que faz interface ao Petro-SIM™. Após a análise dos gráficos que representavam as curvas de destilação TBP e os rendimentos, havia curvas bastante próximas o que mostrava a similaridade com o real, no entanto, verificou-se outros desvios que efetivamente são significativos. Dito isto efetuou-se a pequena alteração na conversão aproximando desta forma os valores e considerando posteriormente o modelo validado e calibrado.

Concluída a validação e calibração do HC, fez-se um esboço do que seria a *dashboard* final e com a colaboração dos sistemas de informação foi possível chegar à *dashboard* de interface pretendida.

5.2 Validação e Calibração do FCC

Para esta fase foi necessário implementar uma unidade instalada recentemente na Refinaria, este procedimento foi efetuado após se validar e calibrar o modelo de forma a proceder à instalação num cenário já correto que traduzia assim a realidade.

O modelo foi implementado com sucesso e verificou-se o êxito do mesmo através dos valores de energia retirada pelo *Cat Cooler*.

No final do processo o modelo encontrava-se calibrado e pronto para tal como o modelo de HC efetuar a *dashboard* pretendida.

Para ambas as unidades seria interessante futuramente reuni-las, ou seja, efetuar uma extensão global dos gasóleos de vácuo. Desta incorporação poderia resultar uma *dashboard* que continha as unidades que tem como principal carga o gasóleo de vácuo o que poderia tornar-se vantajoso.

5.3 Programação em R

Esta fase apesar de concluída não acrescentou valor às simulações e interfaces pretendidas, pois não se conseguiu verificar nenhuma relação matemática que pudesse ser implementada com vista a prever cargas.

5.4 Splitter de Propileno

A avaliação da instalação do *splitter* de propileno mostrou que o objetivo de aumentar o *grade* da corrente de propileno, isto é, aumentar a quantidade de propileno de 75% para 95% é bastante fácil de atingir. Para o efeito a unidade principal seria composta por 2 colunas, uma coluna de fracionamento e outra coluna de retificação como inicialmente estava definido no *C3 Splitter* definido pelo Petro-SIM™. A coluna teria 94 pratos sendo o prato 47 o de alimentação. A pressão do condensador e revaporizador seria 13.29 e 14.67 respetivamente.

A implementação seria feita seguindo o sistema de *Heat Pumped*, o que faria acrescentar unidades à nova instalação com a vantagem económica inerente pois o processo de *Heat Pumped* é economicamente mais viável como foi dito anteriormente.

Este processo diminuiria a desvalorização da corrente pois a perda de valor seria reduzida em 80%.

Futuramente seria pertinente efetuar uma avaliação económica detalhada do processo para conseguir concluir o quanto seria vantajoso implementar a unidade tendo em conta valores e conceitos tal como o CAPEX (custos de investimento) ,OPEX (custos de manutenção), o preço de venda do propileno e propano.

Referências Bibliográficas

- [1] S. A. Galp Energia, SGPS, “Relatório Integrado Galp 2018,” 2019.
- [2] S. A. Galp Energia, SGPS, “Global Energiser,” p. 370, 2017.
- [3] S. A. Galp Energia, SGPS, “40 Anos Refinaria de Sines,” 2018. [Online]. Available: <https://www.galp.com/corp/pt/sobre-nos/a-galp/feiras-e-eventos/40-anos-refinaria-de-sines>. [Accessed: 16-Mar-2019].
- [4] S. A. Galp Energia, SGPS, “Fundamentos de Refinação,” 2018. [Online]. Available: <https://www.galp.com/corp/pt/sobre-nos/os-nossos-negocios/refinacao-e-distribuicao/aprovisionamento-refinacao-e-logistica/fundamentos-de-refinacao>. [Accessed: 25-Mar-2019].
- [5] D. V. Pinto,(2016, 3 de Julho). “Alvin Toffler: o visionário da era digital,” *SOL*.
- [6] C.-C. Kuo, J. Z. Shyu, and K. Ding, “Industrial revitalization via industry 4.0 – A comparative policy analysis among China, Germany and the USA,” *Glob. Transitions*, vol. 1, pp. 3–14, 2019.
- [7] Y. Lu, “Industry 4.0: A survey on technologies, applications and open research issues,” *J. Ind. Inf. Integr.*, vol. 6, pp. 1–10, 2017.
- [8] R. Bock, M. Iansiti, and K. R. Lakhani,(2017, 31 de Janeiro). “What the Companies on the Right Side of the Digital Business Divide Have in Common,” *Harvard Business Rev. Digit. Artic.*, pp. 2–6.
- [9] V. Roblek, M. Meško, and A. Krapež, “A Complex View of Industry 4.0,” *SAGE Open*, vol. 6, no. 2, pp.1-11,2016.
- [10] A. G. Frank, L. S. Dalenogare, and N. F. Ayala, “Industry 4.0 technologies: Implementation patterns in manufacturing companies,” *Int. J. Prod. Econ.*, vol. 210, pp. 15–26, 2019.
- [11] Shell, 2019,“Digital Innovation.” <https://www.shell.com/energy-and-innovation/overcoming-technology-challenges/digital-innovation.html>.
- [12] D. Jeavons, 2019 “Digitalising the Core – How Analytics is Shaping the Energy Industry.” <https://pt.slideshare.net/SparkSummit/digitalising-the-core-how-analytics-is-shaping-the-energy-industry-daniel-jeavons-shell-research-ltd>.
- [13] M. Sahi, “Sensabot Is the First Inspection Robot Approved for Use by Oil and Gas Companies,” 2016.
- [14] N. Ungerleider, 2014 “Oil Giant BP Is First Company Approved To Use Commercial Drones,” https://www.fastcompany.com/3031725/oil-giant-bp-is-first-company-approved-to-use-commercial-drones?fbclid=IwAR3L-8xhuC-B51uLnwVsZiTVnBJdeolK-dWUzO9hA6NwjCLE_MJDICbDdbg.
- [15] BP, 2019, “Digital innovation,” <https://www.bp.com/en/global/corporate/what-we-do/technology-at-bp/digital-innovation.html>.
- [16] J. Lalchandani, 2018,“The digital transformation of manufacturing,” *Gulf News*.
- [17] P. Security, 2017 “Total looking of the total looking,” no. 245, <https://www.total.com/en/media/video/future-energy-patrick-pouyanne-totals-ambition>.
- [18] S. Mukhopadhyay and J. McConnell, “Business Intelligence in Industry 4.0: State of the art and research opportunities,” *Scholarspace.Manoa.Hawaii.Edu*, vol. 9, pp. 3944–3953, 2009.
- [19] E. Hunter ; A. W. Neha Gupta ; J. Hare, “Market Share: Analytics and Business Intelligence, Worldwide, 2018,” 2019.
- [20] S. Moore, 2017 “Gartner Says Worldwide Business Intelligence and Analytics Market to Reach \$18.3 Billion in 2017,” <https://www.gartner.com/en/newsroom/press-releases/2017-02-17->

- [21] S. Costa, M. Y. Santos (2012) "Sistema de business intelligence como suporte à gestão estratégica," Dissertação de Mestrado em Engenharia e Gestão de Sistemas de Informação, Universidade do Minho, Minho.
- [22] A. V. Lima and D. M. Lima, "Business Intelligence como Ferramenta Gerencial no Suporte ao Processo de Business Performance Management," *Univ. Gestão e TI*, vol. 1, no. 1, pp.111-129, 2010.
- [23] M. B. Kocbek, A., & Juric, "Using advanced Business Intelligence methods in business process management," *Conf. Data Min. Data Warehouses (SiKDD 2010)*, pp. 184–188, 2010.
- [24] F. V. Primak, 2008, "Decisões com B.I.-Business Intelligence".
- [25] R. A. da Silva, F. C. Almeida Silva, and C. F. Simões Gomes, "Using Business Intelligence (BI) in Marking Support Sistema Strategic Decision," *Rev. Gestão Inovação e Tecnol.*, vol. 6, no. 1, pp. 2780–2798, 2016.
- [26] L. Columbus, 2019, "What Matters Most In Business Intelligence, 2019," *Forbes*.
- [27] O. M. Yigitbasioglu and O. Velcu, "A review of dashboards in performance management: Implications for design and research," *Int. J. Account. Inf. Syst.*, vol. 13, no. 1, pp. 41–59, 2012.
- [28] J. J. Mistry and A. Jalal, "The Use of Dashboards in Performance Management: Evidence from Sales Managers Oana," *Int. J. Econ. Financ. Issues*, vol. 3, no. 1, pp. 50–53, 2013.
- [29] J. Boyer, B. Frank, B. Green, and T. Harris, 2010, "A Practical Guide for Achieving BI Excellence".
- [30] F. Siraj, "i-Dashboard : Real-Time Business Intelligence for Decision Support", 2016.
- [31] S. A. Taqvi, L. D. Tufa, and S. Muhadizir, "Optimization and Dynamics of Distillation Column Using Aspen Plus®," *Procedia Eng.*, vol. 148, pp. 978–984, 2016.
- [32] M. P. Mendez, "Becoming a refinery leader by changing operations to match new product quality regulations."
- [33] KBC, 2019, "Process simulation," <https://www.kbc.global/software/process-simulation-software/>.
- [34] KBC, 2019, "Process Simulation Petro-SIM ' s Core Capabilities Industry-Specific Process Simulation Models." https://www.kbc.global/uploads/files/services/KBC_Petro-SIM.pdf.
- [35] W. Hu, A. Almansoori, P. K. Kannan, S. Azarm, and Z. Wang, "Corporate dashboards for integrated business and engineering decisions in oil refineries: An agent-based approach," *Decis. Support Syst.*, vol. 52, no. 3, pp. 729–741, 2012.
- [36] J. Freiheit, R. Görner, J. Becker, and F. Fuchs-Kittowski, "Collaborative Environmental Data Management Framework for Microsoft Excel," 2014.
- [37] J. Haydary, 2019, "Chemical Process Design and Simulation: Aspen Plus and Aspen Hysys Applications", pp.1-448.
- [38] S. Ramdharee, E. Muzenda, and M. Belaid, "A review of the equations of state and their applicability in phase equilibrium modeling," *Int. Conf. Chem. Environ. Eng. (ICCEE 2013)*, pp. 84–87, 2013.
- [39] A. K. Coker, 2018, "Petroleum Refining Design and Applications Handbook", Standards Information Network.
- [40] R. G. Sargent, "Advanced Tutorials: Verification and Validation of Simulation Models," *Proc. 2011 Winter Simul. Conf.*, pp. 183–198, 2011.
- [41] B. Park and J. Won, "Simulation Model Calibration and validation: Phase II." vol 1 ,2006.
- [42] B. R. Hellenga, "Requirements for the calibration of traffic simulation models," *Proceedings, Annu. Conf. - Can. Soc. Civ. Eng.*, vol. 4 B, pp. 211–222, 1998.

- [43] A. Vrijdag, D. Stapersma, and T. van Terwisga, "Systematic modelling, verification, calibration and validation of a ship propulsion simulation model," *J. Mar. Eng. Technol.*, vol. 8, no. 3, pp. 3–20, 2009.
- [44] W. J. Dahabreh IJ, Chan JA, Earley A, Moorthy D, Avendano EE, Trikalinos TA, Balk EM, "Modelling and Simulation in the Context of Health Technology Assessment: Review of Existing Guidance, Future Research Needs, and Validity Assessment", 2017.
- [45] E. F.Souza, "Data science — Um panorama geral," 2018.
- [46] D. Matos, 2019 , "R ou Python para Análise de Dados?," <http://www.cienciaedados.com/r-ou-python-para-analise-de-dados/>.
- [47] R. R. Worldis, "Propylene Market 2019 - Global Market Size, Analysis, Share, Research, Business Growth and Forecast to 2025 | Research Reports World," 2019.
- [48] T. M. Zygula and K. Kolmetz, "Design Guidelines for Propylene Splitters," *Spring Natl. Meet.*, pp. 1–10, 2011.
- [49] R. Richards, "Engineering Practice-Propylene Tower Design," *Essence (Downsview)*., vol. 25, no. 5, p. 43, 1994.
- [50] M. Fahim, T. Al-Sahhaf, A. Elkilani, "Fundamentals of petroleum refining" 2010th ed., vol. 111, no. 479., 2010.
- [51] F. Burstein and C. W. Holsapple, "Handbook on Information Systems 1: Basis Themes", *Springer* 2008.
- [52] S. A. Galp Energia, SGPS, "Diagrama Geral de Processo da Refinaria de Sines." 2012.
- [53] A. Julbe and M. Drobek, "Zeolite Y Type," *Encyclopedia of Membranes*, pp. 1-6 , 2016.
- [54] ZILS Global Parques, "Refinaria de Sines," p. 22, 2015.
- [55] S. A. Galp Energia, SGPS, "Manual Introdutório," 2007.
- [56] S.C.Bhatia, 2014, "Advanced Renewable Energy Systems" *Woodhead*, pp. 1-200.
- [57] Y. A. Liu, A.-F. Chang, and P. Kiran, "Predictive Modeling of the Fluid Catalytic Cracking (FCC) Process," *Pet. Refin. Process Model. - Integr. Optim. Tools Appl.*, pp. 183–302, 2018.
- [58] L. M. Wolschlag, K. A. Couch, F. X. Zhu, and J. Alves, "UOP FCC Design advancements to reduce energy consumption and Co2 emissions," *UOP LCC, a Honeywell Co.*, pp. 1–30, 2007.
- [59] E. Palmer, I. Glasgow, S. Nijhawan, D. Clark, and L. Guzman, "High purity propylene from refinery LPG," *Pet. Technol. Q.*, vol. 17, no. 2, pp. 1–12, 2012.
- [60] A. M. Umo and E. N. Bassey, "Simulation and Performance Analysis of Propylene-Propane Splitter in Petroleum Refinery Case Study," *Int. J. Chem. Eng. Appl.*, vol. 8, no. 1, pp. 1–4, 2017.
- [61] D. I. Fonseca, "Cracking catalítico." Setembro de 2018, Apresentação Power Point.
- [62] G. Energia, 2019, "Refinaria de Sines celebra 40 anos com nova vaga de investimentos," pp. 1–2, <https://www.ambientemagazine.com/refinaria-de-sines-celebra-40-anos-com-nova-vaga-de-investimentos/>.
- [63] A. M. Umo and E. N. Bassey, "Simulation and Performance Analysis of Propylene-Propane Splitter in Petroleum Refinery Case Study," *Int. J. Chem. Eng. Appl.*, vol. 8, no. 1, pp. 2– 4, 2017.
- [64] S. M. Mauhar, B. G. Barjaktarović, and M. N. Sovilj, "Optimization of propylene - Propane distillation process," *Chem. Pap.*, vol. 58, no. 6, pp. 386–390, 2004.
- [65] T. J. Cai and M. R. Resetarits, "Pressure drop measurements on distillation columns," *Chinese J. Chem. Eng.*, vol. 19, no. 5, pp. 779–783, 2011.
- [66] Ž. Olujić, L. Sun, A. de Rijke, and P. J. Jansens, "Conceptual design of an internally heat integrated propylene-propane splitter," *Energy*, vol. 31, no. 15, pp. 3083–3096, 2006.

- [67] E. ToolBox, "WABT - weighted average bed temperature." https://www.engineeringtoolbox.com/WABT-weighted-average-bed-temperature-reactor-formula-example-d_1995.html
- [68] I. H. Alhajri and A. R. Moghadassi, "Hydrocracker Reactor Catalyst Activity Model Using Artificial Neural Network," *Lect. Notes Eng. Comput. Sci.*, vol. 2187, no. 2, pp. 674–677, 2010.
- [69] Skybrary, 2017 "Ignition of Fuels." https://www.skybrary.aero/index.php/Ignition_of_Fuels.
- [70] G. H. L. Sciences, 2019 "Industry 4.0: Bioprocessing digital transformation." <https://www.gelifesciences.com/en/us/solutions/bioprocessing/knowledge-center/digital-transformation-in-biomanufacturing>.
- [71] N. Garrido, "2019_01_15_GalpSummit_NG_rev01_Nuno." p. 12, 2019, Apresentação Power Point.
- [72] A. Jaya Karl Kolmetz, "KLM Technology Group Practical Engineering Guidelines for Processing Plant Solutions Coalescer (Engineering Design Guidelines)" no.1, pp.1-47 2012.
- [73] D. I. Fonseca, "Hidrocracking." Setembro de 2018, Apresentação Power Point.

Anexos

Anexo I

Neste anexo encontra-se mais em detalhe as restantes secções e a sua função ou breve explicação dos valores de cada uma.

The screenshot shows the 'Hydrocracker' software window. On the left is a vertical menu with options: Operating Data, Convergence Target, Recycle Gas Target, Reactor Data, Reactor Bed Data, Pressure Drop Data, HPS Data, Economic Data (highlighted), Miscellaneous Data, Tolerances, Feed Data, Recycle Data, Solution Estimates, and Reactor Scaling. The main area displays the 'Economic Data' section with the following fields:

Preheat Cost [Cost/Gcal]	<empty>
Hydrogen Makeup Compressor(s) [Cost/kW-hr]	<empty>
Recycle Compressors(s) [Cost/kW-hr]	<empty>
Catalyst Regen Cost [Cost]	<empty>

At the bottom, there are tabs for Design, Operating Data (selected), Calibration, Worksheet, and Results. Below the tabs are buttons for Delete, OK (highlighted in green), Run, Stop, and Ignored.

Figura 0.1 - - Economic Data,Operating Data Hydrocracker

The screenshot shows the 'Hydrocracker' software window with the 'Miscellaneous Data' section selected in the left menu. The main area displays the following fields:

Combined Fresh Feed T after Heater [C]	336.0
Combined Recycle T after Heater [C]	<empty>
R2 Bed 1 Heat Removal Option	Model Calculates Duty
R2 Bed 1 Heat Removal [Gcal/hr]	0.0000
FOE Lower Heating Value [Mkcal/m3]	9.510
External Liquid Feed split ratio to R2	<empty>

Below these are more fields:

Standard Naphtha FCP [C]	221.1
Standard Distillate FCP [C]	343.3
Liquid Recycle Closure Method	Close internally
Tech Report Type	None
Time Out [hours]	0.2500
Diagnose	0.0000
Accel Method	0.0000
Bypass Range Errors	<input type="checkbox"/>
Always estimate naphtha groups from bulk	<input type="checkbox"/>
Cold Start	<input type="checkbox"/>
Apply Feed Viscosity Check	<input checked="" type="checkbox"/>
UMT Mode	<input type="checkbox"/>

The bottom of the window features the same tabs and buttons as Figure 0.1, with the 'OK' button highlighted in green.

Figura 0.2 - Miscellaneous Data,Operating Data Hydrocracker

Esta seção consiste basicamente no input da temperatura de alimentação e de Reciclo após aquecimento. Os valores que se encontram a vermelho não são inputs são valores gerados pela simulação.

Parameter	Value
Flash Calculation Tolerance	1.000e-005
Damping Factors	
Liquid Recycle Ca/Cn	0.7500
R1 Predict Target	0.8000
Predict Closures Tolerances	
Treat Gas Purity Target	5.000e-004
Net Bottoms Yield Target	2.500e-003
R2 Effluent Sulfur Target (RHDS)	1.000e-003
H2 Recycle Purity Target	1.000e-005
Vent Gas Rate Target	1.000e-003
Liquid Recycle Ca/Cn	1.000e-004
R1 Kinetics Targets	1.000e-003
Conversion Per Pass Target	4.500e-003
Gas System Material Balance Error	1.000e-003
Gas System Material Balance Warning	1.000e-002
Calibration Closures Tolerances	
R2/R3 Kinetics Targets	5.000e-003
R1 Kinetics Targets	5.000e-003
Gas Yield Target	5.000e-004
Recycle Gas Rate Target	1.000e-004
Liquid Recycle Ca/Cn	1.000e-004
Once Through Gas Rate Target	1.000e-003

Figura 0.3 - Tolerances, Operating Data Hydrocracker

Esta seção controla as tolerâncias finais utilizadas durante a convergência do modelo.

Property	Value
Feed Stream	VGO Adj
Data Source	Override
Sulphur [wt %]	< empty >
Very Difficult Sulphur [wt %]	< empty >
Nitrogen [wt %]	< empty >
Bromine Number	< empty >
RI	< empty >
RI Temperature [C]	67.00
Concarbon [wt %]	< empty >
CON [wt %]	< empty >
COA [wt %]	< empty >
Nickel [ppmw]	< empty >
Vanadium [ppmw]	< empty >
Freeze Point [C]	< empty >
Cloud Point [C]	< empty >
Pour Point [C]	< empty >
Silica [ppmw]	< empty >
Arsenic [ppmw]	< empty >

Total Feed 650F+ Specific Gravity (Dry) 0.9280

☐ Estimate RI From Feed H/C Ratio if missing

Feed CA Characterization Method: Use Feed SG an

Figura 0.4 - Feed Data, Operating Data Hydrocracker

Este segmento permite o controlo das condições de alimentação usadas no modelo.

Operating Data

- Convergence Target
- Recycle Gas Target
- Reactor Data
- Reactor Bed Data
- Pressure Drop Data
- HPS Data
- Economic Data
- Miscellaneous Data
- Tolerances
- Feed Data
- Recycle Data
- Solution Estimates**
- Reactor Scaling

R1

Bed 1	367.1 C
Bed 2	383.5 C
Bed 3	396.8 C
Bed 4	0.0000 C
Bed 5	0.0000 C
Bed 6	0.0000 C

R2

Bed 1	396.9 C
Bed 2	396.3 C
Bed 3	396.2 C
Bed 4	0.0000 C
Bed 5	0.0000 C
Bed 6	0.0000 C

R3

Bed 1	359.1 C
Bed 2	362.4 C
Bed 3	364.0 C
Bed 4	369.1 C
Bed 5	0.0000 C
Bed 6	0.0000 C

HPS #1

Mkup Rate	85.44 kn_m3/h
Vent Rate	1.116e-005 kn_m3/h
Hydrogen	95.0841 mol %
Methane	2.1554 mol %
Ethane	0.4887 mol %
Propane	0.6850 mol %
iButane	0.6856 mol %

Use Solution Estimates ☒
Lock Solution Estimates ☐
Clear Solution Estimates

Design Operating Data Calibration Worksheet Results

Delete OK Run Stop Ignored

Figura 0.5 - Solution Estimates, Operating Data Hydrocracker

Esta seção é utilizada para reduzir o tempo de convergência do modelo através da introdução de diversos valores de partida para os seus cálculos.

Operating Data

- Convergence Target
- Recycle Gas Target
- Reactor Data
- Reactor Bed Data
- Pressure Drop Data
- HPS Data
- Economic Data
- Miscellaneous Data
- Tolerances
- Feed Data
- Recycle Data
- Solution Estimates
- Reactor Scaling**

Total Fresh Feed Rate: 293.3 m3/h
New Total Fresh Feed Rate: <empty>

Vent Gas Rate [kn_m3/h]: 1.116e-005
Scaled Vent Gas Rate [kn_m3/h]: <empty>

HPS S1

Treat Gas Rate [kn_m3/h]	289.1	0.0000	175.1
Scaled Treat Gas Rate [kn_m3/h]	<empty>	<empty>	<empty>

Reactor R1 Reactor R2 Reactor R3

Catalyst Weight [kg]	2.326e+004	4.876e+004	5.034e+004
Scaled Catalyst Weight [kg]	<empty>	<empty>	<empty>
Liquid Quench Rate [tonne/hr]	0.0000	0.0000	0.0000

Reactor has been scaled!

Catalyst Weight [kg]	3.775e+004	4.204e+004	4.224e+004	4.531e+004
Scaled Catalyst Weight [kg]	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>
Liquid Quench Rate [tonne/hr]	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Design Operating Data Calibration Worksheet Results

Delete OK Run Stop Ignored

Figura 0.62 - Reactor Scaling, Operating Data Hydrocracker

Por fim esta seção permite que se consiga dimensionar o modelo de modo a representar uma operação fisicamente maior ou menor, utilizando, portanto, um novo valor de alimentação como indicador do tamanho.